



Qüestió

Quaderns d'Estadística
i Investigació Operativa

Any 1998, volum 22, núm. 1
Segona època

Entitats patrocinadores:

Universitat de Barcelona
Universitat Politècnica de Catalunya
Institut d'Estadística de Catalunya

Entitat col·laboradora:

International Biometric Society



Generalitat de Catalunya
**Institut d'Estadística
de Catalunya**

Any 1998, volum 22, núm. 1

SUMARI

Editorial

Estadística

El modelo lineal sin término independiente y el coeficiente de determinación.	
Un estudio Monte Carlo	3
R. Dios Palomares	
Un procedimiento para obtener clusters utilizando la D.V.S. de una matriz.	
Comparaciones con el biplot y con el modelo Q-factorial	39
J.L. González Caballero y M.J. Valderrama Bonnet	
¿Cuántos clusters hay en una población?	69
J.J. Prieto Martínez	
Una nota sobre el contraste de relaciones de cointegración entre índices de precios . . .	83
A. Sansó Rosselló, M. Artís Ortúño y J. Suriñach Caralt	

Investigació Operativa

Implementación de un algoritmo primal-dual de orden superior mediante el uso de un método predictor-corrector para programación lineal	103
J. Castro	
Un algoritmo de punto interior para programación cuadrática a través de problemas equivalentes separables	117
J. Castro	

Estadística Oficial

The post randomisation method for protecting microdata	145
J. Gouweleeuw, P. Kooiman, L. Willenborg and P.P. de Wolf	
The analysis of seasonality in economic statistics: a survey of recent developments	157
C. Planas	

Biometria

Modelización de la distribución espacial de quistes en el estómago de la marsopa mediante un proceso de Gibbs	175
J. Mateu y F. Montes	

Secció docent i problemes

Cursos i congressos d'estadística

Novetats de software



LA REVISTA *QUESTIÓ* A INTERNET

L'Institut d'Estadística de Catalunya, editor de *Qüestió*, es complau en anunciar la posada en marxa del seu WEB a la xarxa d'Internet, on hi figura informació detallada sobre la naturalesa i continguts de la nostra revista a l'adreça general <http://www.idescat.es/idescat.htm>

Amb aquest nou servei es pretén que la comunitat científica i professional vinculada a la recerca en estadística i investigació operativa al nostre país, pugui localitzar, entre d'altres, una àmplia recopilació de la producció editorial dels darrers onze anys, convenientment classificada per àmbits complementaris. En efecte, des d'ara pot consultar-se interactivament tant la referenciació exhaustiva per autors i matèries dels articles publicats com els sumaris en el seu idioma original i la seva traducció a l'anglès, si s'escau.

En termes més generals, també es posa a l'abast dels autors, subscriptors i lectors, així com dels organismes patrocinadors i col·laboradors de *Qüestió*, informacions actualitzades sobre els àmbits institucionals i administratius de la revista com els òrgans de govern, responsables de seccions, avaluadors i col·laboradors, novetats editorials, normes i eines per presentar originals o ressenyes per a la inserció d'anuncis, la venda o la subscripció ordinària.

Connectant amb l'adreça <http://www.bio.ub.es/estad/personal/cuadras/questio.htm> es pot consultar l'estat dels articles sotmesos a les seccions «Estadística», «Investigació Operativa» i «Biometria». Complementàriament, l'Institut d'Estadística de Catalunya també habilita l'adreça electrònica questio@idescat.es per a la correspondència amb la secretaria de *Qüestió*, la tramitació d'originals, la recepció d'iniciatives o suggeriments i, en general, facilitar l'atenció als lectors, col·laboradors i autors potencials.

Amb la voluntat d'esdevenir una eina de treball efectiva per a la promoció i millora de l'estadística i la investigació operativa en el nostre país, els tres organismes patrocinadors de *Qüestió* reafirmen el compromís conjunt en la seva difusió per la xarxa Internet, mitjançant l'actualització constant de referències i l'ampliació progressiva dels seus continguts.

Eduard Bonet, director de *Qüestió*

EDITORIAL

Després del parèntesi de l'edició especial del número 3 del volum 21 (1997), aquest primer número del volum 22 (1998) reemprèn la publicació ordinària d'articles i altres textos, amb la presència de nou originals repartits entre les quatre seccions temàtiques de la revista. D'altra banda, i d'acord amb el compromís anunciat en el volum 21, aquesta publicació subsana el retardament d'un quadrimestre que patia *Qüestió*, tot fent coincidir l'ordre cronològic amb la referència temporal de cada número de la revista, encara que cada any s'hagi publicat sempre l'equivalent als tres números de què consta cada volum.

Cal destacar que el preu de subscripció de *Qüestió* per enguany es manté per tercer any consecutiu, en un continuat esforç de contenció de la despesa a càrrec dels subscriptors. No obstant això, per al volum 23 (1999) es preveu un augment proporcional a l'augment del nombre d'articles, notes i seccions editorials, així com, en definitiva, de les pàgines impresa que enregistra la revista des del 1993: en efecte, es pot constatar que en el quinquenni 1993-97 la mitjana anual d'articles i pàgines impresa per volum se situa en 20 articles i 493 pàgines, augmentant sensiblement la del període 1987-91 (gairebé 16 articles i 344 pàgines per volum).

Comentari de les seccions «Estadística», «Investigació Operativa» i «Biometria»

En aquest número, les seccions esmentades contenen un total de set articles. Dels quatre originals de la secció «Estadística», l'article «El modelo lineal sin término independiente y el coeficiente de determinación. Un estudio Monte-Carlo», de R. Dios, compara la distribució i el comportament, mitjançant simulació, de cinc expressions diferents del coeficient de determinació i conclou quines són les més adequades. A continuació, «Un procedimiento para obtener clusters utilizando la descomposición en valores singulares de una matriz. Comparaciones con el biplot y con el modelo Q-factorial», de J.L. González y M.J. Valderrama, estudia com poder agrupar dades fent ús del biplot i l'anàlisi Q-factorial, comenta la problemàtica d'aquests mètodes, i proporciona un nou procediment d'agrupació que es justifica i s'il·lustra amb exemples. De temàtica semblant és l'article «¿Cuántos clusters hay en una población?», de J.J. Prieto, en el qual s'estima el nombre d'agrupacions d'una població, representada per una mostra, mitjançant tècniques de remostratge, que es compara amb un altre estimador. Finalment, l'article «Una nota sobre el contraste de relaciones de cointegración entre índices de precios», d'A. Sansó, M. Artís i J. Suriñach, estudia el contrast de relacions d'equilibri entre variables econòmiques i índexs de preus, aportant algunes conclusions sobre la problemàtica d'alguns plantejaments recents.

La secció «Investigació Operativa» inclou dos originals interrelacionats que són del mateix autor, J. Castro. Els articles «Implementación de un algoritmo primal-dual de orden superior mediante el uso de un método predicción-corregidor para programación lineal» i «Un algoritmo de punto interior para programación cuadrática a través de problemas equivalentes separables» representen, de fet, la continuació d'un treball previ del mateix autor i els títols respectius són suficientment explicatius del seu contingut.

L'únic article de la secció «Biometria», «Modelización de la distribución espacial de quistes en el estómago de la marsopa mediante un proceso de Gibbs», de J. Mateu i F. Montes, mostra com la hipòtesi de distribució espacial completa no és consistent amb les dades i proposa un nou enfocament basat en un procés de Gibbs.

Carles Cuadras, editor executiu

Comentari de la secció «Estadística Oficial» i d’altres apartats

La secció «Estadística Oficial» compta amb dues aportacions originals que ja han estat contextualitzades en números recents de *Qüestió*. D’una banda, «The Post Randomisation Method for protecting microdata», de J. Gouweleeuw, P. Kooiman, L. Willenborg i P.P. de Wolf, és una presentació dels treballs a Statistics Netherlands sobre les tècniques d’aleatorització de registres individualitzats per preservar la seva confidencialitat estadística; el mètode PRAM assegura la validesa de les inferències estadístiques a partir de les dades perturbades, especialment amb variables categòriques, respecte de les pèrdues o imprecisions associades a les tècniques de *data swapping* o bé la recodificació/supressió de valors individuals. En segon lloc, amb l’article de C. Planas, «The analysis of seasonality in economic statistics: a survey of recent developments», es completa la publicació iniciada en el volum 20 (1996) de les ponències presentades en la sessió organitzada per l’Institut d’Estadística de Catalunya al COMPSTAT’96 sobre recerca recent en l’estadística oficial. En aquest darrer treball, l’autor avaluava el tractament del factor estacional i l’extracció de tendències que facilita l’aplicació mixta del mètode X12-RegARIMA i la metodologia SEATS-TRAMO, aproximació promoguda recentment per l’Oficina estadística de la Unió Europea (Eurostat) en el cas de sèries econòmiques amb comportaments no lineals i/o components cícliques.

A continuació, la «Secció docent i problemes» continua amb la presentació successiva de nous enunciats i la resolució dels problemes publicats immediatament anteriors al present número. Per la seva banda, «Novetats de software» reapareix, en aquesta ocasió, amb una extensa presentació de la darrera versió sota Windows del conegut sistema estadístic d’exploració multivariant de grans taules de dades SPAD. La recen-

sió de T. Aluja, un dels principals coneixedors i impulsors del programa en el nostre país, permet copsar la potència dels mòduls i les utilitats que incorpora la versió v3.2, inspirada en l'estratègia de l'anàlisi de dades pròpia de l'escola francesa i els avenços informàtics en el context del *data mining*.

Finalment, l'apartat dedicat a «Cursos i congressos d'estadística» reproduceix una presentació del *TES Institute-Training for European Statisticians*, que actualitza la informació publicada en el número 3 del volum 21 (1997), tant des del punt de vista institucional com pel que fa a la ressenya de cursos i seminaris del *Core Programme 1997-98* previstos a partir de l'abril i d'altres activitats formatives que també patrocina Eurostat en el decurs del 1998. D'aquesta manera, s'amplia la col·laboració iniciada amb *Qüestió* en la redifusió d'accions comunitàries en el camp de l'estadística oficial. També s'anuncia la XIII Conference of the International Association for Statistical Computing —COMPSTAT'98— (Bristol, 24-28 d'agost 1998), amb la presentació del seu programa preliminar i les dades per a la inscripció al mateix.

Enric Ripoll, editor executiu

Estadística

EL MODELO LINEAL SIN TÉRMINO INDEPENDIENTE Y EL COEFICIENTE DE DETERMINACIÓN. UN ESTUDIO MONTE CARLO

RAFAELA DIOS PALOMARES*

Universidad de Córdoba

En el presente trabajo se analiza y compara mediante un experimento Monte Carlo el comportamiento de cinco expresiones para el Coeficiente de Determinación cuando el modelo lineal se especifica sin término independiente. Se ensayan distintos valores del parámetro poblacional P^2 , que mide la proporción de varianza explicada por el modelo, introduciendo también la multicolinealidad como factor de variación en el diseño. Se confirma el coeficiente propuesto por Heijmans y Neudecker (1987) y el de Barten (1987), como idóneos para medir la bondad del modelo.

The linear model without a constant term and the coefficient of determination. A Monte Carlo study.

Palabras clave: Coeficiente de determinación, bondad de ajuste, modelo lineal sin término independiente, método Monte Carlo.

Clasificación AMS: (MSC): 62J20

* Rafaela Dios Palomares. Dpto. de Estadística e Investigación Operativa. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Agrónomos y de Montes de la Universidad de Córdoba.

– Recibido en mayo de 1996.

– Aceptado en octubre de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

La econometría empírica tiene como objetivo fundamental llegar a la estimación de un modelo econométrico que represente el comportamiento conjunto de las variables económicas objeto de estudio. Dicha estimación debe ser contrastada tanto para verificar el acierto en la previa especificación del modelo, como para admitir el cumplimiento de las hipótesis supuestas al mismo. Posteriormente se utiliza el modelo con fines predictivos y/o para analizar los parámetros estructurales.

Es de vital importancia, por tanto, lo que se denomina análisis de la bondad del modelo, siendo éste un tema que se puede analizar desde varios puntos de vista. Dependiendo de que los fines del estudio sean predictivos o estructurales, se enfoca de distinta forma el criterio «bondad». En el primer caso, será primordial la medida de la capacidad predictiva, siendo de escasa importancia la identificación de cada parámetro estructural.¹ En el segundo caso, sin embargo, un modelo será tanto mejor cuanto más precisa sea la estimación de dichos parámetros. La problemática inherente a todo trabajo econométrico tiene su base en el hecho del desconocimiento de lo que se denomina el Proceso Generador de los Datos (P.G.D.). Por tanto, en general, el modelo estimado será tanto más «bueno» cuando mejor capte dicho proceso.

Esta circunstancia da lugar a que el analista tenga que decidir la utilización de un modelo estimado, en base a la aplicación de ciertos criterios de bondad que, por supuesto, llevan implícita cierta probabilidad de error en la decisión. Es también muy frecuente, debido al desconocimiento del P.G.D., que se plantee la elección entre varios modelos que se podrían admitir como buenos, porque representen posibles especificaciones alternativas aceptables.

La gran importancia del tema de la selección y aceptación del mejor modelo ha dado lugar al desarrollo de numerosas investigaciones, cuyos resultados se plasman en el establecimiento de distintos criterios de bondad.

El criterio más usado como estadístico de bondad de ajuste es el denominado Coeficiente de Determinación Múltiple, sobre el que se pueden encontrar abundantes trabajos. En Kendall (1960), quedó patente el carácter de «evergreen»² de dicho coeficiente, que se sigue manteniendo como tema recurrente en Estadística y Econometría.

Un indicador relacionado con el coeficiente de determinación es el Cp de Mallows, que puede verse en los trabajos de Gorman y Toman (1966), y Malow (1973).

¹En presencia de multicolinealidad exacta, la estimación de funciones de parámetros estructurales no afecta ni impide la predicción.

²Es un coeficiente cuyo carácter relativo lo convierte en tema siempre abierto al debate.

Para evaluar la capacidad predictiva, Theil (1961) planteó el estadístico U cuya descomposición detecta el origen de la discrepancia entre las series observada y predicha.

Otros criterios desarrollados posteriormente buscan encontrar un equilibrio entre la simplicidad del modelo y la bondad de ajuste. La base de los mismos está en minimizar la suma de cuadrados del error de predicción o minimizar los valores de la función de verosimilitud; planteados como una función del Error Cuadrático Medio y del número de parámetros, cabe señalar los siguientes: Criterio de Información de Akaike (AIC) (Akaike, 1974), Error de Predicción Finito (FPE) (Akaike, 1970), HQ (Hannan and Quinn, 1979), Schawarz (1978), Shibata (1981).

La aplicación de los criterios comentados, que se pueden ver en Judge *et al.* (1985) y Maddala (1988), tiene más sentido en el ámbito de decidir ante varios modelos que para determinar la bondad de un modelo en términos absolutos. Con este objetivo, se han seguido desarrollando métodos de selección, tanto para modelos anidados como no anidados, donde se penaliza la complejidad en pro de la «parsimonia».

Las últimas metodologías econométricas, sobre todo para series de tiempo, estudian lo que se denomina «encompassing» de modelos econométricos (Ver Mizon (1984) o Mizon and Richard (1986)), para determinar si un modelo «incluye» o «domina» a otro, tanto desde el punto de vista de la varianza del error, como de la predicción. En esta línea tienen relevancia el test J propuesto por Davidson and Mackinnon (1981) y los introducidos por Chong and Hendry (1986) y desarrollados por Ericsson (1989) y Clements and Hendry (1991).

Sin embargo, llama la atención la lentitud con que la mayoría de los programas econométricos existentes en el mercado están incorporando estos criterios, que por otra parte considero de gran utilidad en el desarrollo del trabajo en Econometría Empírica.

Hay que reconocer asimismo que, a pesar de que se sigue investigando en análisis de bondad y selección de modelos, el protagonista, y siempre presente en todo trabajo econométrico que incluya la estimación y contrastación del modelo, es el Coeficiente de Determinación en su versión original y Ajustado.

Ambos coeficientes son de fácil interpretación desde el punto de vista del grado de explicación del modelo, al estar definidos entre 0 y 1. Además, el Coeficiente de Determinación Ajustado incorpora una corrección en función del número de variables explicativas y el tamaño de la muestra, que permite establecer comparaciones entre distintos modelos. Koerts y Abrahamse (1969) obtuvieron la función de distribución de dicho coeficiente y, posteriormente, Smith (1973) y Ebberler (1975) completaron los resultados obtenidos por los primeros autores, en el ámbito de establecer proba-

bilidades desde el punto de vista comparativo entre los coeficientes calculados para varios modelos alternativos.

Hay que considerar, sin embargo, que el Coeficiente de Determinación, tal como se define para el modelo lineal general, no cumple las mismas propiedades cuando se aplica al modelo lineal sin término independiente, ya que puede tomar valores inferiores a cero. Es por esta circunstancia que diversos investigadores han aconsejado Coeficientes de Determinación alternativos, cuya idoneidad en el análisis de la bondad del modelo no ha sido extensivamente analizada en pequeñas muestras.

En adición, está claro que se siguen realizando muchos trabajos en Econometría aplicada, sin prestar la debida atención al hecho de que el modelo sin término independiente requiere un tratamiento específico, en lo que al cálculo y la interpretación del Coeficiente de Determinación se refiere, y esta negligencia puede provocar errores importantes en la toma de decisiones.

Por este motivo, he considerado de gran interés estudiar la repercusión que puede tener el uso de las distintas formas propuestas para el Coeficiente de Determinación en el modelo lineal sin término independiente. Para ello se ha diseñado un experimento Monte Carlo que permite calcular las distribuciones empíricas de dichos coeficientes y establecer medidas que nos lleven a definir su comportamiento en relación con el análisis de la bondad del modelo.

2. ASPECTOS TEÓRICOS

La medida de bondad de ajuste más usada en el trabajo aplicado es el Coeficiente de Determinación Múltiple, denominado R^2 . Se especifica el modelo uniecuacional

$$(1) \quad y = X\gamma + u$$

donde X contiene una columna de unos y las observaciones de $k - 1$ variables explicativas con

$$E(u'u) = \sigma^2 I_T^3$$

Para este modelo, el estimador minimocuadrático será $\hat{\gamma} = (X'X)^{-1}X'y$, de modo que podemos escribir

$$(2) \quad y = X\hat{\gamma} + \hat{u} = \hat{y} + \hat{u}$$

³Cuando $E(u'u) = \sigma^2 W$, con $W \neq I_T$, o cuando estimamos un sistema de ecuaciones aparentemente no relacionadas, la definición de un R^2 o un estadístico apropiado de bondad de ajuste no es obvia (Judge *et al.* 1985)

Se define el vector $\mathbf{1} = (1, 1, 1, \dots, 1)'$, la media muestral de y , $\bar{y} = \frac{\Sigma y}{T}$, y la matriz $A = I - (1/T)\mathbf{1}\mathbf{1}' = I - \mathbf{1}(\mathbf{1}'\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'$, que multiplicada por cualquier matriz transforma sus columnas en valores desviados con respecto a la media de esa columna.

De ese modo, $Ay = (y - \mathbf{1}\bar{y})$ y

$$(3) \quad y'Ay = \hat{y}'A\hat{y} + \hat{u}'\hat{u} + 2\bar{y}\mathbf{1}'\hat{u}$$

donde se ha aplicado $X'\hat{u} = X'(y - X\hat{y}) = 0$. Si además, el modelo tiene un término independiente, se cumple $\mathbf{1}'\hat{u} = 0$, es decir, que la suma de los residuos se anula y la expresión (3) se puede expresar como

$$(4) \quad y'Ay = \hat{y}'A\hat{y} + \hat{u}'\hat{u}.$$

El Coeficiente de Determinación se define mediante la expresión

$$(5) \quad R^2 = 1 - \frac{\hat{u}'\hat{u}}{y'Ay}$$

y debido a la descomposición en (4), está siempre comprendido entre 0 y uno, y se interpreta como el tanto por uno de la variación de y explicada por el modelo.

Además, R^2 es igual al cuadrado del coeficiente de correlación de Pearson entre la variable endógena, y , y la estimada, \hat{y} . Se entiende, por tanto, como una medida de la capacidad predictiva del modelo, y podemos decir que la expresión (5), en el modelo lineal general, coincide con la siguiente

$$(6) \quad R^2 = \frac{(y'\hat{y})^2}{(y'Ay)(\hat{y}'\hat{y})}$$

Tiene especial interés la relación entre el R^2 y la prueba F de significación global del modelo, donde se contrasta la hipótesis nula de que todos los parámetros, a excepción del término independiente, son cero.

Dicha relación es la siguiente:

$$(7) \quad F = \frac{R^2(T - k)}{(1 - R^2)(k - 1)}$$

La aceptación de la hipótesis nula implica que ninguna variable explicativa influye sobre y .

Debido a que la adición de una variable explicativa siempre aumenta el valor de R^2 , se usa con frecuencia un coeficiente alternativo que recibe el nombre de Coeficiente

de Determinación Ajustado, cuya expresión es la siguiente:

$$(8) \quad \bar{R}^2 = 1 - \frac{(\hat{u}' \hat{u})/(T-k)}{(y' A y)/(k-1)}$$

que disminuye al añadir una variable irrelevante al modelo.

Llegados a este punto, vamos a analizar el Coeficiente de Determinación como medida de bondad de ajuste desde un punto de vista teórico y desde la perspectiva poblacional.

Descomponiendo la matriz X del modo:

$$(9) \quad X = (\mathbf{1}, Z),$$

el vector de parámetros queda igualmente descompuesto como:

$$(10) \quad \gamma = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

donde α es el término independiente y β el subvector que contiene los $k-1$ parámetros restantes. Así, el vector de estimadores quedará descompuesto de forma que el estimador de β será:

$$(11) \quad b = (Z' AZ)^{-1} Z' A y.$$

Si se parte de que $(X' X)$ es una matriz de rango completo, también lo será el producto matricial $(Z' AZ)$, y por tanto lo es $M = (1/T)Z' AZ$.

Se deduce fácilmente la existencia del límite en probabilidad de M , que denominaremos M_L , y expresamos como $M_L = \text{plim } M = \lim M$ cuando $T \rightarrow \infty$. Igualmente se demuestra que es no singular.

En el modelo con término independiente se puede aplicar la expresión $A \hat{u} = \hat{u}$ para expresar la descomposición (4) del modo:

$$(12) \quad y' A y = b' Z' AZ b + 2\hat{u}' A Z b + \hat{u}' A \hat{u} = b' Z' AZ b + \hat{u}' \hat{u}$$

Si además se define $m = \frac{y' A y}{T}$, se puede expresar (5) como:

$$(13) \quad R^2 = \frac{b' Z' AZ b}{y' A y}$$

y como

$$(14) \quad R^2 = \frac{b' M b}{m}.$$

Si $h = \frac{\hat{u}' \hat{u}}{T}$, también

$$(15) \quad R^2 = 1 - \frac{h}{m}$$

Analizando la descomposición (13), se puede considerar el término $(b' Z' A Z b)$ como la parte explicada de la variación muestral de la variable endógena y el Coeficiente de Determinación como la fracción de la misma que explica el modelo.

Si se enfoca desde el punto de vista poblacional, y siguiendo a Cramer (1984) y a Barten (1987), se puede deducir el valor al que converge en probabilidad la variable aleatoria R^2 , cuando $T \rightarrow \infty$.

Se puede demostrar que:

$$(16) \quad \text{plim } b' M b = \beta' M_L \beta$$

$$(17) \quad \text{plim } m = \text{plim } b' M b + \text{plim } h = \beta' M_L \beta + \sigma^2$$

Por tanto, aplicando la definición (15), el límite en probabilidad del Coeficiente de Determinación será:

$$(18) \quad \text{plim } R^2 = \frac{\beta' M_L \beta}{\beta' M_L \beta + \sigma^2} = P^2$$

Teniendo en cuenta que los regresores no son estocásticos y que son controlados por el investigador, M_L se puede considerar como una característica poblacional. Por tanto, P^2 puede ser enfocado como la fracción de la varianza poblacional de la variable endógena que es explicada por la variación de las variables explicativas.

Analizando a continuación las particularidades de los desarrollos anteriores en el caso de que el modelo no tenga término independiente, se especifica (1) con la restricción $\alpha = 0$, quedando del modo:

$$(19) \quad y = Z \beta + u$$

El estimador minimocuadrático de β , será óptimo, y se expresa como:

$$(20) \quad b = (Z' Z)^{-1} Z' y$$

y el vector de residuos correspondiente a (20) y (21), será:

$$(21) \quad \hat{u} = y - Z b$$

En este caso, sin embargo, hay que tener en cuenta que aunque se cumple que $Z' \hat{u} = 0$, no se cumple siempre que la suma de los residuos se anule ($\mathbf{1}' \hat{u} = 0$), aunque se demuestre fácilmente que $\text{plim } \bar{u} = 0$, siendo \bar{u} la media aritmética de \hat{u} .

Si se analiza además la descomposición (13), se ve que la variación de y alrededor de su media será:

$$(22) \quad y' A y = b' Z' AZ b + \hat{u}' \hat{u} - T(2\bar{u}\bar{z}' b + \bar{u}^2)$$

y por tanto,

$$(23) \quad m = b' M b + (1/T) \hat{u}' \hat{u} - (2\bar{u}\bar{z}' b + \bar{u}^2),$$

con lo que no es difícil verificar que:

$$(24) \quad \text{plim } m = \beta' M_L \beta + \sigma^2,$$

es la misma expresión deducida en (18), para el modelo con término independiente.

Queda patente de este modo que se puede admitir el valor de P^2 como el límite al que debería tender cualquier medida de bondad de ajuste que se plantea. Basado en estos resultados, Barten (1987) propone las siguientes condiciones como deseables a cumplir por el Coeficiente de Determinación en todos los casos:

- (25) $a) \quad \text{plim } R^2 = P^2,$
- $b) \quad 0 \leq R^2 \leq 1,$
- $c) \quad \text{Si } b = 0, R^2 = 0,$
- $d) \quad \text{Si } \hat{u} = 0, R^2 = 1.$

Ya que el objetivo propuesto es analizar la bondad de ajuste en el modelo lineal sin término independiente, el primer paso será estudiar el comportamiento del R^2 definido en (5) y que, por supuesto, cumple las condiciones (26) en el modelo completo.

En primer lugar, cabe decir que no coincide con el cuadrado del coeficiente de correlación entre la y y la \hat{y} estimada, ni se relaciona con la prueba F como se vio en (7).

En segundo lugar, tampoco se obtiene el mismo resultado con (5) y con (15), ya que no se cumple la expresión (13).

En cuanto a las condiciones (26), hay que decir que sólo se cumplen a y d , ya que si $b = 0$, no necesariamente $R^2 = 0$, pudiendo tomar valores negativos, de modo que está definido entre $-\infty$ y 1.

Por este motivo, queda claro que no es el coeficiente idóneo para medir la bondad de ajuste en el caso que nos ocupa, sobre todo en términos comparativos, ya que se pierde además el sentido de ser el tanto por uno de la varianza explicada por el modelo.

3. ALTERNATIVAS PROPUESTAS

Debido a la particularidad expuesta del modelo sin término independiente, se han propuesto diversas alternativas al Coeficiente de Determinación definido en (5), que pasamos a comentar.

Judje *et al.* (1985) ofrecen dos formas para R^2 que consideran razonables. La primera es la medida de la variación de y alrededor de 0 y no con respecto a su media, aludiendo a que si es razonable especificar un modelo sin constante, también lo es esta medida. Además, hay que tener en cuenta el hecho de que si bien, como hemos visto, no se cumple la expresión (13), sí se cumple en cambio

$$(26) \quad y'y = \hat{y}'\hat{y} + \hat{u}'\hat{u},$$

por lo que R^2 puede ser definido como:

$$(27) \quad R^2 = 1 - \frac{\hat{u}'\hat{u}}{y'y}$$

Esta definición tiene, además, correspondencia con la prueba F de significación global del modelo sin término independiente, ya que el estadístico se calcula mediante:

$$F = \frac{\hat{y}'\hat{y}/k}{\hat{u}'\hat{u}/(T-k)}$$

y la relación sería:

$$(28) \quad F = \frac{R^2}{(1-R^2)} \frac{(T-k)}{k}$$

La segunda opción aconsejada por dichos autores es el cuadrado del coeficiente de correlación entre la variable y observada y la \hat{y} estimada, que ya introdujimos en la expresión (6), y que en este caso no coincide con (5) ni tampoco con (28). Se presenta como una buena medida de la capacidad predictiva del modelo.

Al analizar la bondad de ajuste del modelo, Drymes (1984) plantea como «necesario» calcular el Coeficiente de Determinación usando la formula (28) y propone asimismo el cálculo del Coeficiente de Determinación Ajustado como:

$$(29) \quad \bar{R}^2 = 1 - \frac{\hat{u}'\hat{u}/(T-k)}{y'y/T}$$

En dicho análisis llama la atención sobre la precaución de no trabajar por error con datos desviados con respecto a la media, ya que los resultados no coinciden con los

de los datos sin desviar (como en el modelo completo) y dicho tratamiento carece de sentido.

Por otro lado, en Greene (1993) se advierte también del problema inherente al cálculo del Coeficiente de Determinación (5) y se comenta que la alternativa

$$R^2 = \frac{b' Z' y}{y' A y}$$

resulta igualmente problemática ya que puede tomar valores superiores a 1.

En Ramanathan (1992 y 1993) se comenta que aunque algunos paquetes informáticos calculan el R^2 (28), hay que tener en cuenta que dicho coeficiente no es comparable con el de (5), al no tener el mismo denominador. En ambos textos se propone como coeficiente ajustado la expresión:

$$(30) \quad \bar{R}^2 = 1 - \frac{\widehat{\text{var}}(\hat{u})}{\widehat{\text{var}}(y)}$$

Ramanathan (1993), también considera buena medida el coeficiente de determinación que relaciona la y observada y estimada, definido en (6).

Para hacer comparaciones entre modelos con y sin término independiente, Ramanathan (1992), recomienda usar (5), a pesar de que puede tomar valores negativos. Llama la atención también sobre el hecho de que no todos los paquetes estadísticos calculan el Coeficiente de Determinación mediante la misma fórmula, por lo que conviene conocer dicha fórmula en cada caso, con el fin de poder interpretar los resultados.

Heijmans and Neudecker (1987) estudian las propiedades asintóticas del coeficiente que hemos definido en (6) y lo plantean como idóneo en todos los casos, demostrando que su límite en probabilidad es P^2 , y que en el modelo completo este coeficiente coincide con el de (5).

Por último, Barten (1987) dedica su trabajo al tema que nos ocupa, y analiza el comportamiento de algunas fórmulas propuestas para el Coeficiente de Determinación en el modelo sin término independiente.

Con respecto al coeficiente (28), que es uno de los más recomendados en la bibliografía y calculado en varios paquetes estadísticos, hay que decir que falla en la condición a , ya que su límite en probabilidad resulta superior a P^2 .

Barten (1987) concluye que el que ofrece mejores resultados es el siguiente:

$$(31) \quad R^2 = \frac{(\hat{y}' A \hat{y})}{(\hat{y}' A \hat{y}) + \hat{u}' \hat{u}}$$

demonstrando que cumple todas las condiciones (26), que hemos planteado como deseables para cualquier medida de bondad del modelo.

4. TRATAMIENTO EN PAQUETES ECONOMÉTRICOS

Se comenta a continuación el tratamiento que se hace sobre la bondad del modelo, en los paquetes econométricos más usados en la actualidad y que he tenido ocasión de revisar.

Llama la atención el hecho de que el paquete TSP 4.2 A (1991) para micro, así como el (TSP 7.03 (1990) y la nueva versión para Windows denominada EVIEWS (1994), no efectúan ningún cálculo específico para el modelo sin término independiente, aportando la misma salida de resultados y ofreciendo por tanto sólo los coeficientes (5), y el (7).

Sin embargo, el programa TSP 4.1 (1987) aplica para todos los casos el coeficiente definido en (6), que como vimos, mide el cuadrado de la correlación entre la variable y y la estimada por el modelo.

Otros paquetes como el PCGIVE 6.01 (1988) y el BMDP, en todas sus versiones, incluso la versión 7.0 (1993) para micro y el BMDP New System 1.1 (1994) para Windows, distinguen el caso en que no se estima el término independiente y aplican la fórmula (28).

El STATGRAPHICS 6.0 (1994) y el STATISTICA for Windows (1993) calculan, además de (28), el Coeficiente de Determinación Ajustado que vimos en (30).

En cambio, el RATS 4.0 (1992) y el SHAZAM 6.2 (1990) dan una información completa al aportar no sólo el coeficiente (28) sino también el (5) y el (7).

Con respecto a los demás criterios de bondad comentados en la introducción, cabe resaltar que son el PCGIVE, RATS y SHAZAM, los más completos en proporcionar dichas medidas.

5. DISEÑO Y METODOLOGÍA

El objetivo de la investigación que se ha realizado es, como ya se comentó en la introducción, el análisis individual y comparativo del comportamiento del Coeficiente de Determinación calculado, según las definiciones más aconsejadas para el estudio de la bondad del modelo lineal sin término independiente. Teniendo en cuenta que

el coeficiente (5) no es idóneo, resulta de gran interés estudiar cuales de las fórmulas propuestas tendrán propiedades óptimas en pequeñas muestras.

Como se vio en el apartado 2, una de las condiciones (26) obliga a que el límite en probabilidad de R^2 coincida con el valor P^2 , que se puede considerar la porción de la varianza poblacional explicada por el modelo. En base a esto, la distribución muestral del Coeficiente de Determinación debe reflejar del mejor modo posible dicho valor P^2 .

El planteamiento se ha basado en el establecimiento previo del Proceso Generador de Datos y la comprobación posterior del acoplamiento encontrado entre la distribución muestral de cada estadístico y el valor poblacional (P^2) con que se ha generado la muestra. Para ello se ha diseñado un experimento de simulación Monte Carlo (Hendry, 1984), cuyas particularidades se comentan a continuación.

El modelo a estudiar se ha especificado con dos variables explicativas y del modo:

$$y_t = \beta_1 z_{1t} + \beta_2 z_{2t} + u_t, \quad \text{para } t = 1, \dots, T \quad \text{y } u \approx N(0_T, \sigma^2 I_T).$$

El tamaño de la muestra se ha fijado en $T = 15$, ya que se pretende analizar el fenómeno para pequeñas muestras. Los valores teóricos asignados a los parámetros⁴ han sido por simplicidad $\beta_1 = \beta_2 = 10$.

En dicho diseño se han considerado dos factores de variación que han sido P^2 y la correlación entre z_1 y z_2 . Ante la posibilidad de que el comportamiento de los estadísticos calculados no fueran indiferentes al valor de P^2 con que generamos la muestra, hemos realizado el experimento para distintos valores de dicho parámetro. Por otro lado, hemos investigado la incidencia de la presencia de multicolinealidad en el modelo, por lo que se ha introducido una segunda fuente de variación concretada en la correlación muestral entre z_1 y z_2 .

Las variables explicativas son por hipótesis fijas en el muestreo, y por las características del método su magnitud no influye en los resultados. Por tanto, la construcción de la matriz X ha estado en función de la correlación que debía de haber entre dichas variables. El procedimiento que se ha seguido es partir de variables ortogonales para correlación cero y crear z_2 en función de z_1 para conseguir una determinada correlación. Un posterior ajuste de valores se realizó para que la correlación muestral fuera exactamente la requerida.

En nuestro diseño, los factores de variación son parámetros acotados entre 0 y 1. Como quiera que nuestro objetivo era tomar decisiones generales, el procedimiento adecuado sería plantear un diseño con factores aleatorios.

⁴Se han ensayado otros valores para los parámetros estructurales, pero no se recogen en el trabajo porque los resultados, como cabía esperar, son prácticamente iguales.

Tras unos primeros ensayos de sensibilidad, y ante la evidencia de que los resultados no eran sensibles a valores con diferencias inferiores a una décima, se ensayaron todos los valores entre 0 y 1, con intervalo de una décima.

Para no diversificar demasiado los resultados, se presentarán los que producen diferencias más notables. Éstos son 0.2, 0.5, y 0.9 para P^2 , y 0.4 y 0.8 para r .

El número de muestras generadas en cada caso ha sido de 1000.

El procedimiento metodológico que se ha planteado para el tratamiento de cada muestra ha sido el siguiente:

- 1) *Generar una muestra de tamaño 15 con un P^2 y un $r(z_1, z_2)$ conocidos:*

Si en (19), se supone $M_L = M$,

$$P^2 = \frac{\beta' M \beta}{\beta' M \beta + \sigma^2},$$

Si se establece el valor teórico de β , y unos valores para las variables z , esto nos determina el valor $\beta' M \beta$, que se llamará K , y se puede escribir:

$$(32) \quad P^2 = \frac{K}{K + \sigma^2},$$

y por tanto deducir

$$(33) \quad \sigma^2 = K \frac{(1 - P^2)}{P^2}$$

La expresión (33) nos indica que variando la relación entre la varianza teórica explicada K y la magnitud de la varianza del error (σ^2), se puede conseguir un valor de P^2 para el Proceso Generador de Datos. Enfocado en sentido inverso, (34) establece que dado un valor de K , el P.G.D. con un P^2 deseado, se simula generando la variable de error u con una varianza cuyo valor cumpla la expresión (34).

- 2) *Estimar el modelo para esa muestra por mínimos cuadrados ordinarios.*

- 3) *Calcular los siguientes estadísticos:*

- a) El Coeficiente de Determinación que se definió en (5) y que goza de excelentes propiedades en el modelo con término independiente

$$R^2_1 = 1 - \frac{\hat{u}' \hat{u}}{y' A y}$$

- b) El Coeficiente de Determinación que aconsejan con más frecuencia en la bibliografía y que definimos en (28)

$$R_2^2 = 1 - \frac{\hat{u}' \hat{u}}{y' y}$$

- c) El cuadrado de la correlación entre la y observada y la \hat{y} estimada que vimos en (6)

$$R_3^2 = \frac{(y' A \hat{y})^2}{(y' A y)(\hat{y}' A \hat{y})}$$

- d) El Coeficiente de Determinación aconsejado por Barten (1987), que vimos en (32)

$$R_4^2 = \frac{(\hat{y}' A \hat{y})}{(\hat{y}' A \hat{y}) + \hat{u}' \hat{u}}$$

- e) Por último, teniendo en cuenta que algunos autores calculan el Coeficiente de Determinación en el modelo completo, dividiendo la Suma de Cuadrados Explicada por la Suma de Cuadrados Total debido a que coincide con (5)⁵, se ha creído de interés valorar la importancia del error que se comete al aplicar esta fórmula en el caso que nos ocupa. Por este motivo, se ha calculado también el estadístico:

$$R_5^2 = \frac{\hat{y}' \hat{y} - T \bar{y}^2}{y' A y}$$

La información aportada por los estadísticos calculados para las 1000 muestras nos han permitido establecer las siguientes medidas de comportamiento para cada Coeficiente de Determinación (R_i^2):

- a) *Medidas Descriptivas*: Valores máximos y mínimos, media, varianza e histograma de frecuencias.

- b) *Medidas de Proximidad a P^2 creadas al efecto*:

- b1) *Error Cuadrático medio con respecto a P^2* :

$$ECP_i = \frac{\sum(R_i^2 - P^2)^2}{1000}$$

- b2) *Probabilidad de que el Coeficiente R_i^2 sea mayor que P^2* :

$$PA_i = \frac{fma}{1000},$$

siendo fma la frecuencia absoluta de valores de R_i^2 que han resultado superiores a P^2 .

⁵Peña (1989) propone dicha fórmula y no la (5) para el cálculo del Coeficiente de Determinación.

Esta probabilidad (empírica) indica el tanto por uno de veces que cabe esperar que el valor calculado de R_i^2 sea superior a P^2 , y por tanto se incurra en sobrevalorar la adecuación de la muestra al modelo teórico.

b3) Sesgo de R_i^2 con respecto a P^2 :

$$SE_i = \frac{\sum R_i^2}{1000} - P^2$$

Todo el trabajo se ha desarrollado con el paquete econométrico EVIEWS, para el que se han realizado los programas necesarios, gracias a la posibilidad añadida de cálculo matricial que ha incorporado esta nueva versión para Windows de μ TSP.

6. RESULTADOS

El carácter de la investigación, así como las dos fuentes de variación introducidas para analizar los cinco coeficientes estudiados, proporcionan una gran complejidad de resultados que resulta difícil resumir para una eficiente interpretación.

En dicha interpretación, vamos a estudiar en primer lugar el comportamiento de los cinco coeficientes individualmente, para lo cual presentaremos sus medidas descriptivas, sus histogramas y sus medidas de proximidad a P^2 . En segundo lugar, estableceremos las oportunas comparaciones entre los cinco coeficientes, con el fin de establecer criterios que nos permitan deducir cuales de ellos resultan con mayor capacidad para captar el valor de P^2 .

La presentación de resultados se hará en forma gráfica en su mayoría, con el fin de ayudar a la comprensión de los mismos y con el ánimo de que en el análisis comparativo resultará más enriquecedor e ilustrativo.

Los valores descriptivos de los cinco coeficientes se presentan en las tablas nº 1 al 6, de modo que cada una de ellas se refiere a un caso distinto cuyas características de P^2 y r aparecen en la cabecera correspondiente.

Tablas. Valores descriptivos de los coeficientes R_i^2

Tabla nº 1	$P^2 = 0.2$		$r = 0.4$		
	R_1^2	R_2^2	R_3^2	R_4^2	R_5^2
Media	0.250487	0.999485	0.262428	0.255417	0.256866
Mediana	0.234359	0.999509	0.244715	0.236102	0.234215
Desv. Típica	0.176111	0.000207	0.166722	0.164881	0.166513

Tabla n° 2		$P^2 = 0.5$		$r = 0.4$
		R_1^2	R_2^2	R_3^2
Media		0.527197	0.999869	0.532573
Mediana		0.542468	0.999875	0.544730
Desv. Típica		0.167218	5.09E-05	0.159083
				0.150426
				0.155234

Tabla n° 3		$P^2 = 0.9$		$r = 0.4$
		R_1^2	R_2^2	R_3^2
Media		0.910702	0.999985	0.911282
Mediana		0.915039	0.999986	0.915781
Desv. Típica		0.035041	5.73E-06	0.034804
				0.034387
				0.052371

Tabla n° 4		$P^2 = 0.2$		$r = 0.8$
		R_1^2	R_2^2	R_3^2
Media		0.246804	0.999963	0.301187
Mediana		0.276058	0.999965	0.286882
Desv. Típica		0.219090	1.45E-05	0.178472
				0.097233
				0.137430

Tabla n° 5		$P^2 = 0.5$		$r = 0.8$
		R_1^2	R_2^2	R_3^2
Media		0.539314	0.999991	0.576692
Mediana		0.578774	0.999992	0.590899
Desv. Típica		0.191573	3.51E-06	0.150818
				0.096894
				0.227150

Tabla n° 6		$P^2 = 0.9$		$r = 0.8$
		R_1^2	R_2^2	R_3^2
Media		0.910573	0.999999	0.917666
Mediana		0.916493	0.999999	0.922364
Desv. Típica		0.036991	4.00E-07	0.033539
				0.030635
				0.154538

Los histogramas de frecuencias aparecen en los gráficos n° del 1 al 5, donde la presentación se ha hecho en otra dimensión, de modo que cada gráfico incluye las salidas de un coeficiente para los seis casos presentados. Pretendemos así facilitar la labor comparativa de los resultados.

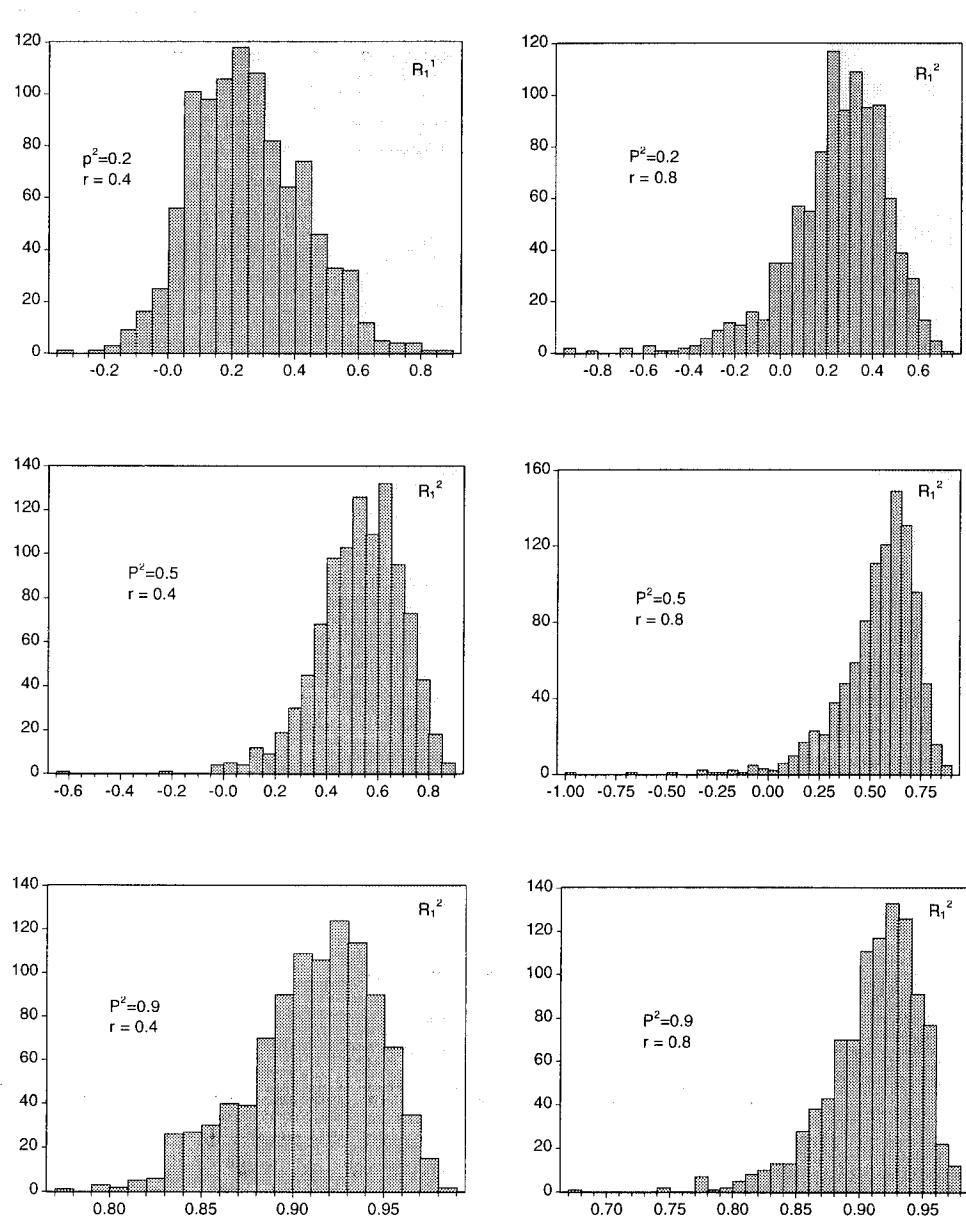


Gráfico 1. Histogramas de Frecuencias de R_1^2 .

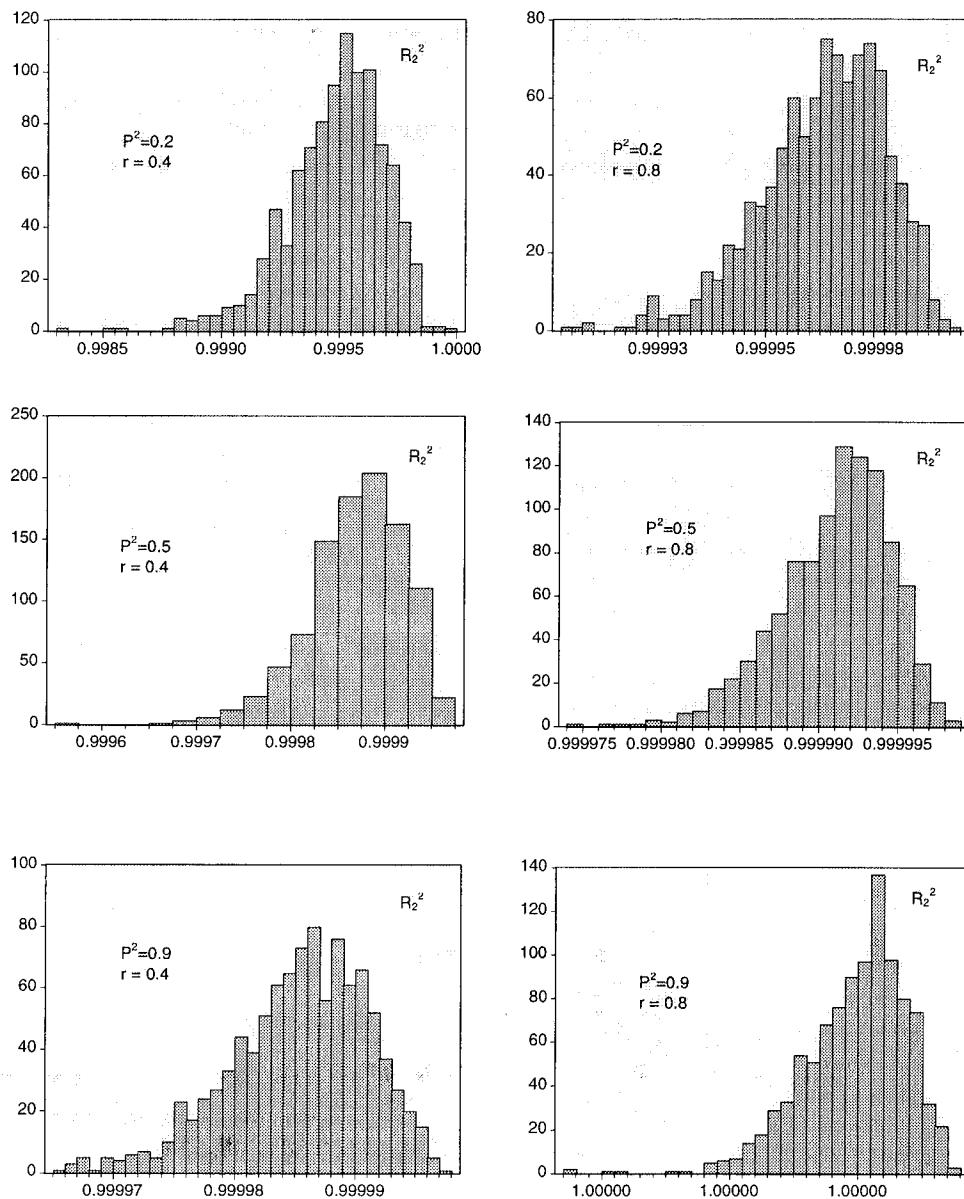


Gráfico 2. Histogramas de Frecuencias de R_2^2 .

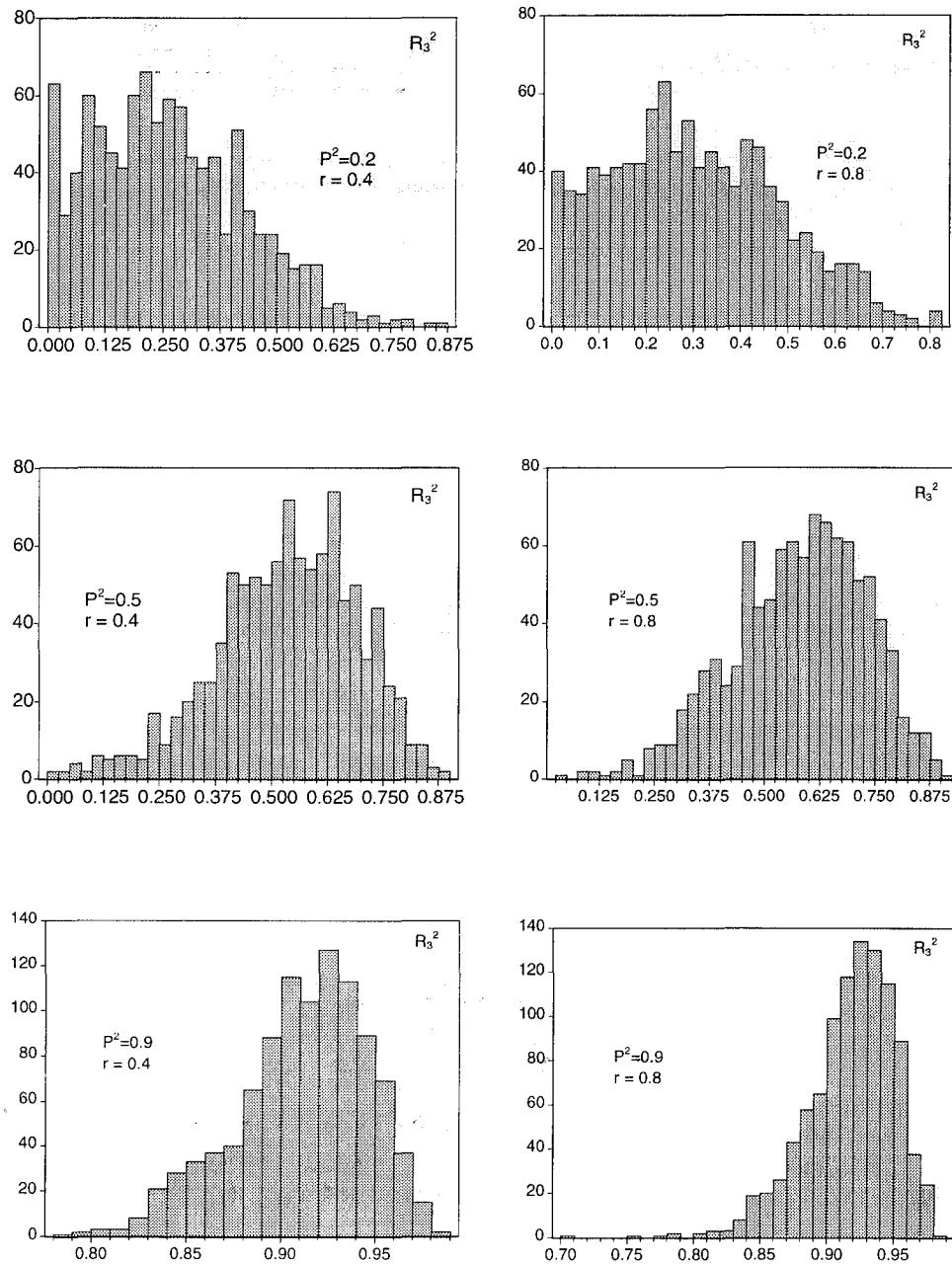


Gráfico 3. Histogramas de Frecuencias de R_3^2 .

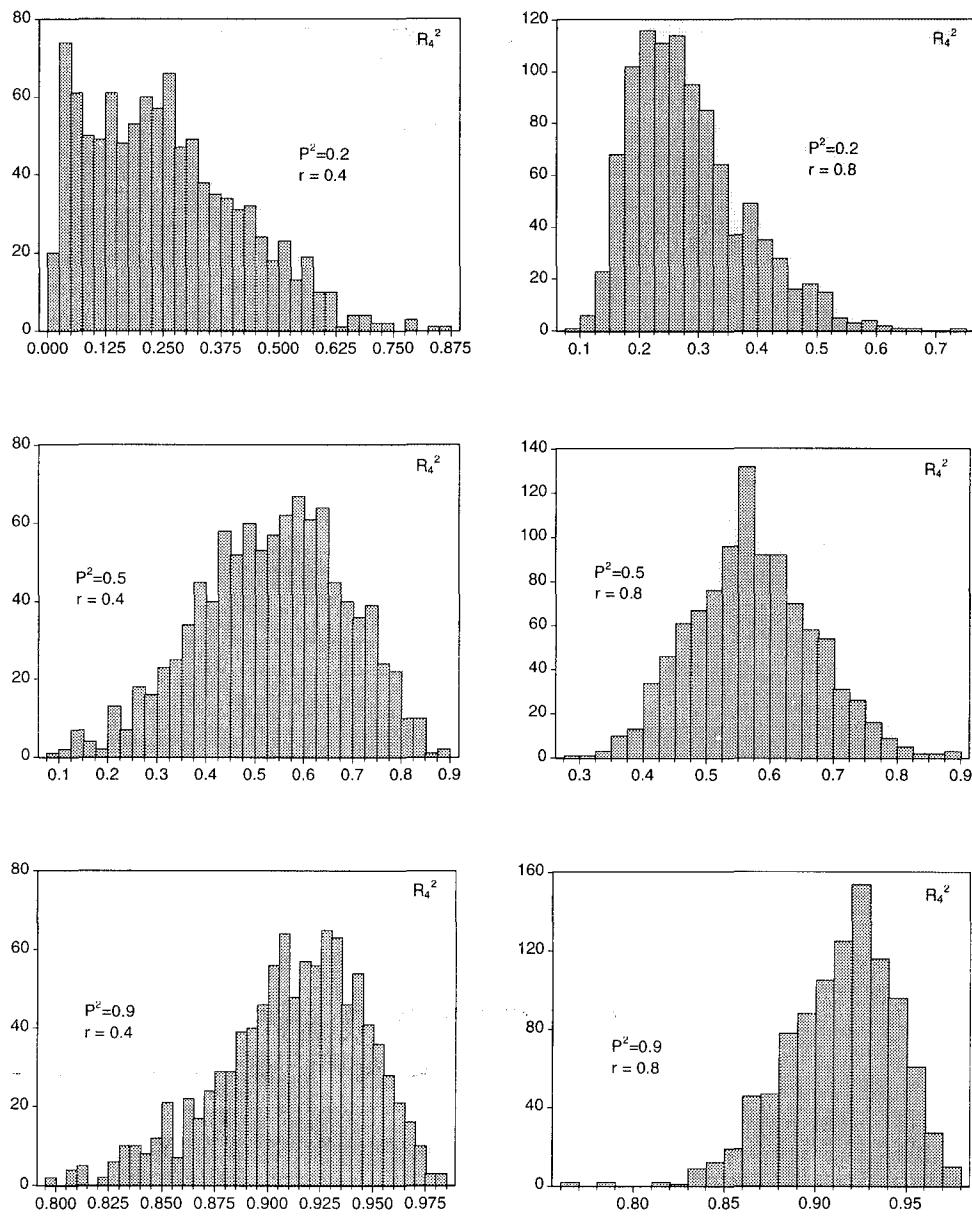


Gráfico 4. Histogramas de Frecuencias de R_4^2 .

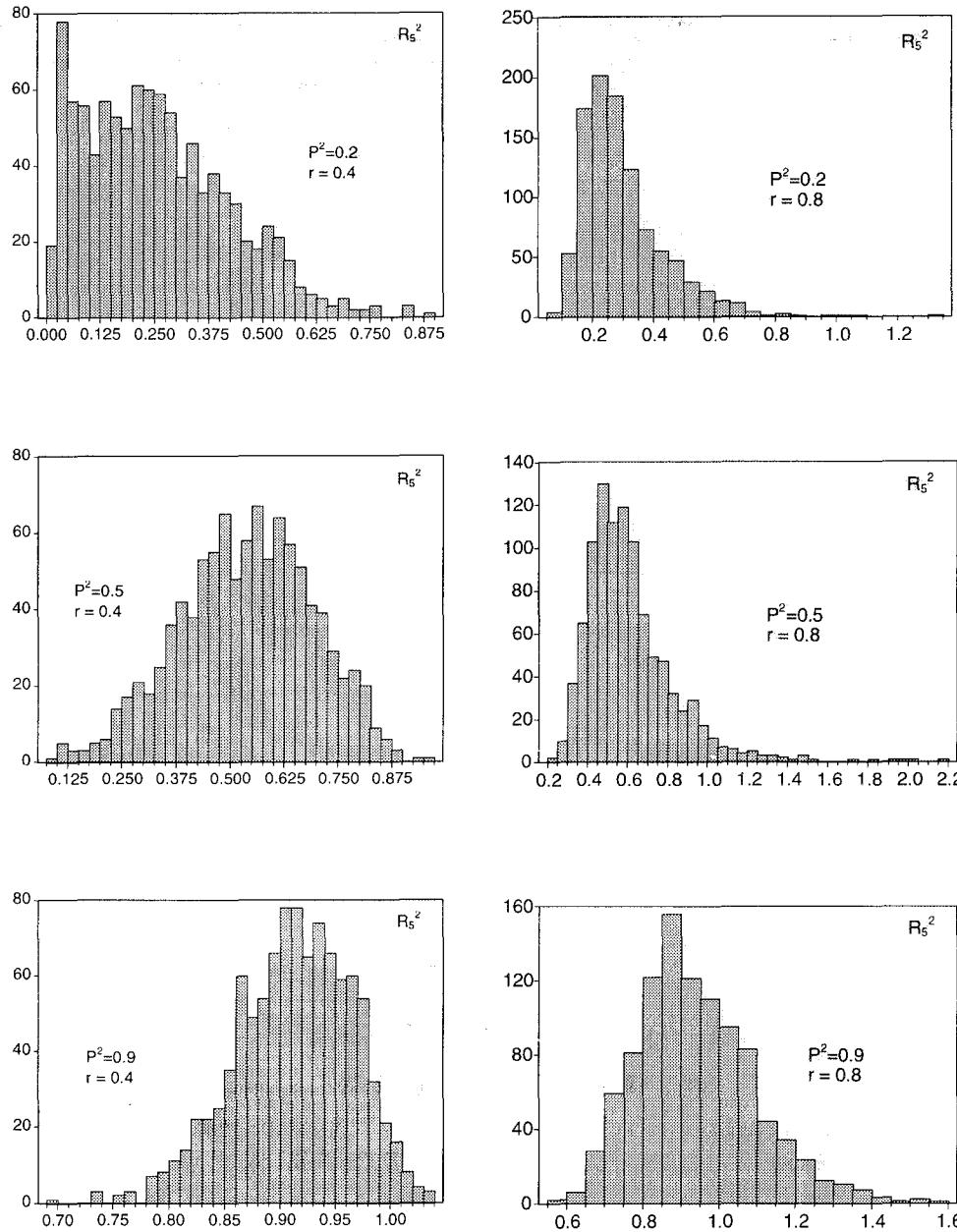


Gráfico 5. Histogramas de Frecuencias de R_5^2 .

Si se observan los histogramas de frecuencias⁶, se puede apreciar que las distribuciones empíricas calculadas para R_1^2 , R_3^2 , R_4^2 , y R_5^2 se agrupan alrededor del valor correspondiente de P^2 en todos los casos. En cambio, llama la atención el hecho de que la de R_2^2 se distribuye invariantemente entre 0.9 y 1, para todos los valores de P^2 generados.

En cuanto a las medidas de posición, se ve que tanto la media muestral como la mediana son superiores a P^2 . En concordancia con lo comentado para las distribuciones, la media y la mediana del coeficiente R_2^2 resultan muy alejadas de P^2 , cuando este parámetro toma los valores 0.2 y 0.5. En todos los demás casos, y para el resto de los coeficientes, ambas medidas de posición se encuentran relativamente próximas a P^2 .

En cuanto al ámbito del espacio muestral, cabe señalar que los de R_2^2 , R_3^2 , y R_4^2 están comprendidos entre 0 y 1, mientras que el de R_1^2 incluye valores negativos con un mínimo de -0.6, y el de R_5^2 supera a 1, alcanzando un valor máximo de 2.15.

La desviación típica disminuye en general al aumentar P^2 , advirtiéndose en los histogramas menos dispersión para valores más altos de P^2 .

Los gráficos del n° 6 al 8 representan la posible incidencia de los parámetros P^2 y r , que se han introducido en el diseño como fuentes de variación en las medidas de proximidad calculadas para los coeficientes.

A la vista del gráfico n° 6, se puede ver que, como regla general, el valor de ECP_i disminuye en gran medida al aumentar P^2 . Esta circunstancia confirma el comportamiento observado para la dispersión de las distribuciones, ya que al estar menos dispersas también es menor la magnitud de ECP_i para los casos en que la media está próxima a P^2 .

La influencia de r en ECP , sin embargo, parece menos importante y, además, se detectan tendencias distintas, ya que ECP_1 , ECP_3 y ECP_5 aumentan con r , y ECP_4 tiende a disminuir, mientras que ECP_2 se mantiene constante.

Según se puede ver en el gráfico n° 7, las medidas PA_1 y PA_3 aumentan claramente con P^2 , mientras que PA_4 y PA_5 no presentan uniformidad ya que adoptan distintas tendencias según sea el valor de r . En cuanto a PA_2 , hay que decir que su valor se mantiene en 1 para todos los casos, debido a que se encuentra toda la distribución a la derecha del valor P^2 . En cuanto a la incidencia de la multicolinealidad, vemos un aumento generalizado de PA_i provocado por este problema, salvo en el caso ya comentado de PA_2 .

⁶Para ilustrar los resultados hemos sombreado el área que está a la derecha de P^2 , que mediremos posteriormente como PA.

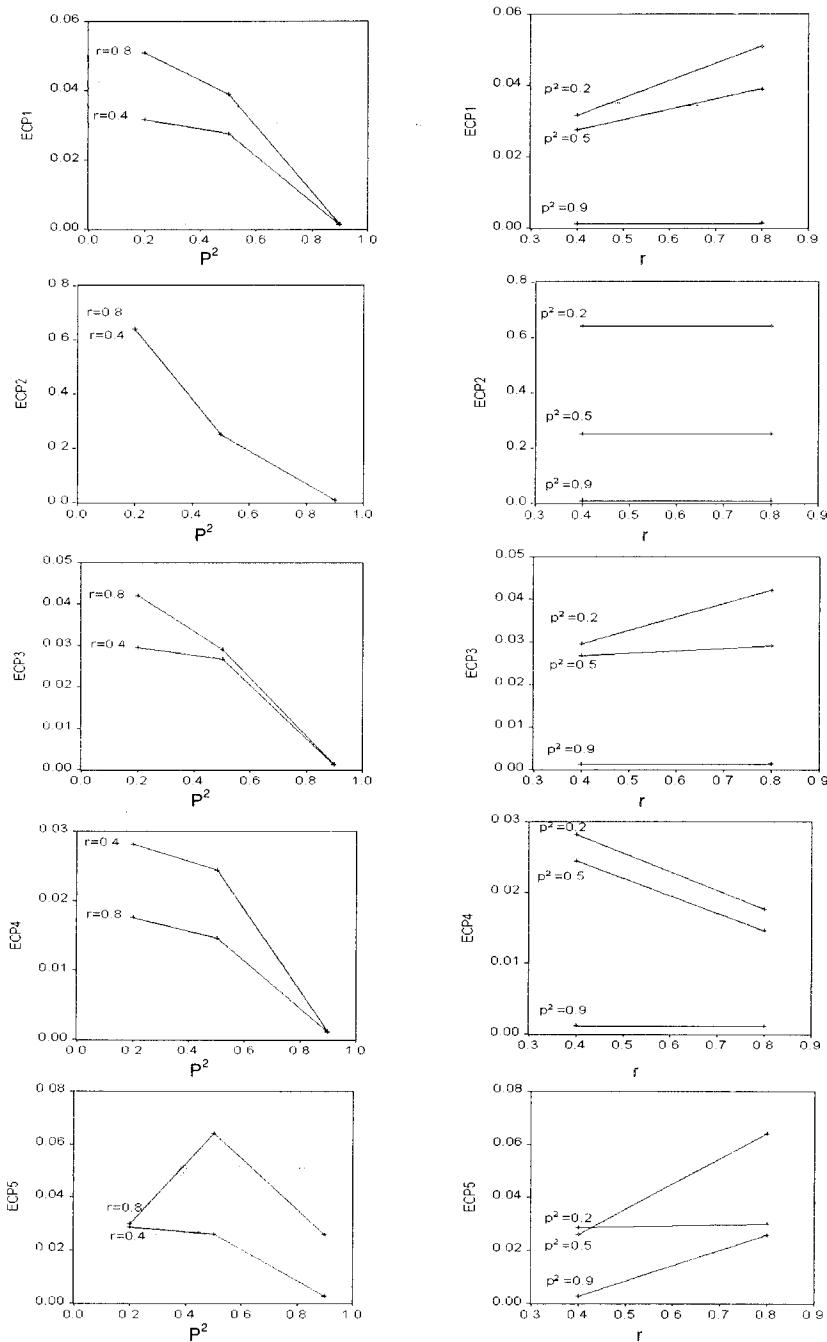


Gráfico 6. Representaciones de ECP frente a P^2 y r .

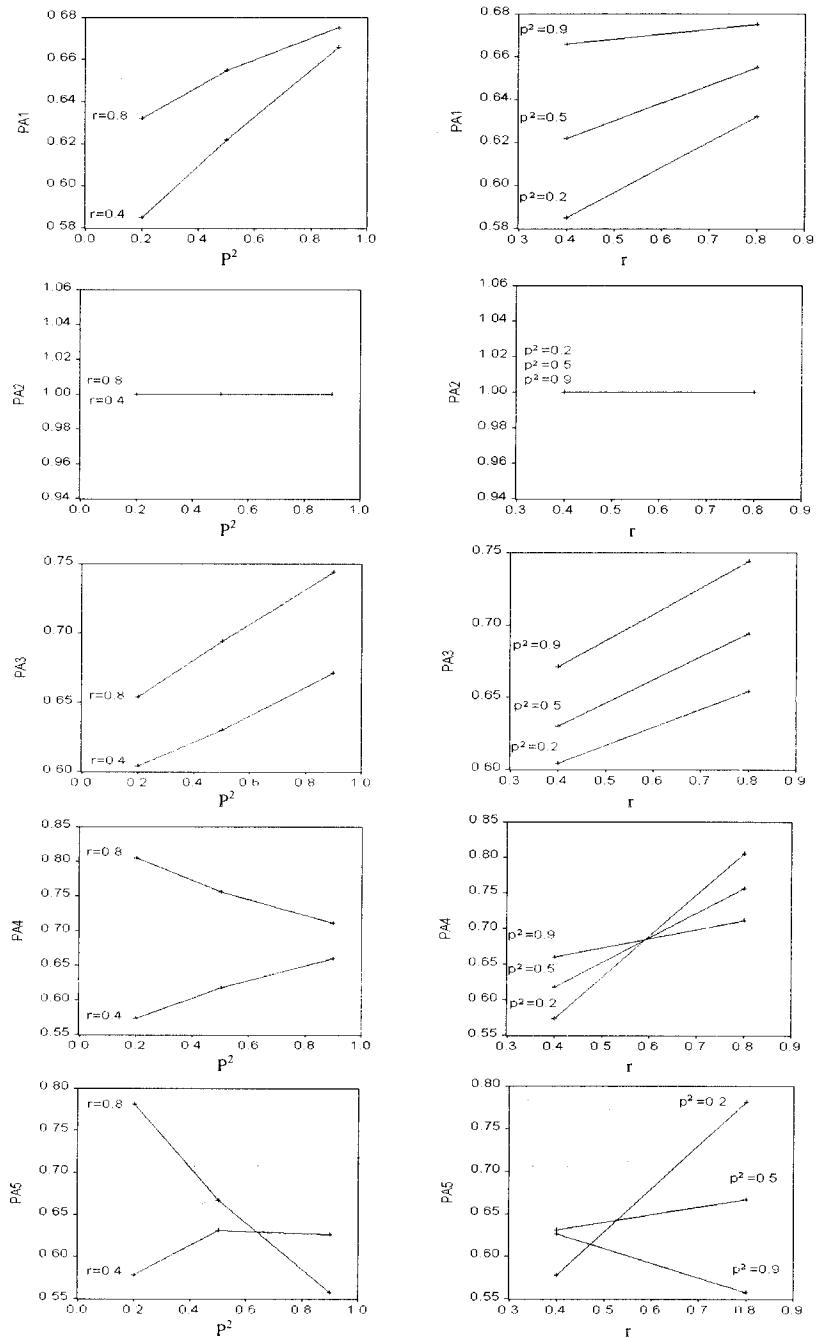


Gráfico 7. Representaciones de PA frente a P^2 y r .

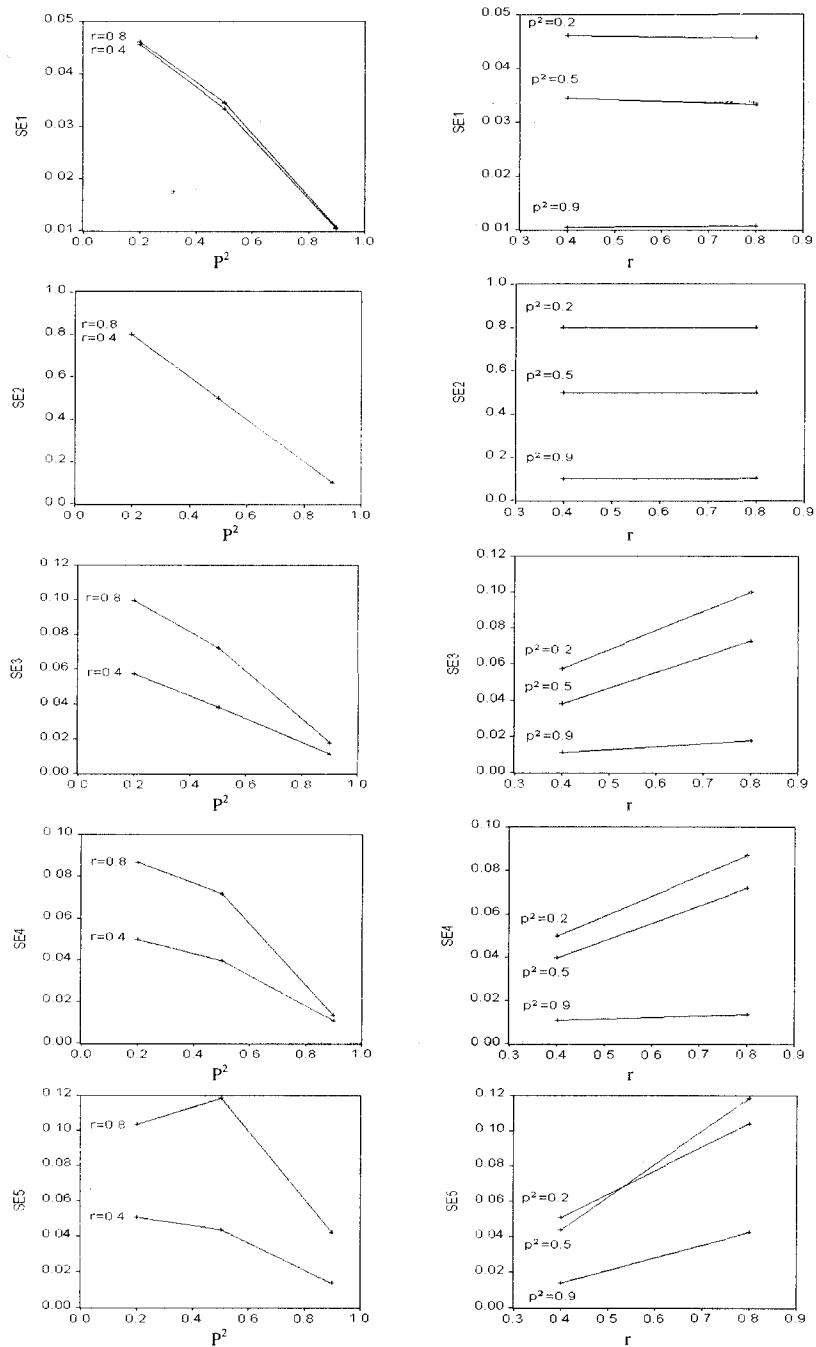


Gráfico 8. Representaciones de SE frente a P^2 y r .

La tercera medida de proximidad, recogida en el gráfico n° 8, presenta una gran uniformidad en su tendencia a disminuir cuando aumenta el valor de P^2 . Por el contrario, un incremento en la correlación de las variables explicativas redundante en un aumento de SE_i , salvo para SE_1 y SE_2 en los que no se aprecia incidencia alguna.

Si se aborda la perspectiva comparativa entre los cinco coeficientes calculados, se pueden comentar los siguientes resultados:

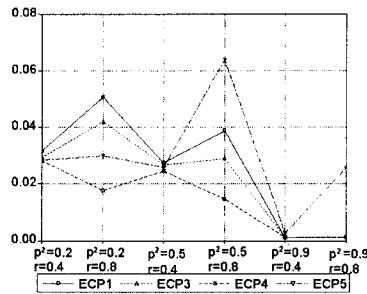


Gráfico 9. Representaciones de ECP_1 , ECP_3 , ECP_4 y ECP_5 .

En el gráfico 9 se han representado los valores calculados de la medida ECP_i , para todos los coeficientes a excepción de ECP_2 , que se presenta en el gráfico 10 debido a que la diferencia de magnitud con el resto desvirtuaría la gráfica conjunta. Se puede observar que el coeficiente que menor error cuadrático presenta para todos los casos es R_4^2 , y los mayores se deben a R_1^2 con valores bajos de P^2 y a R_5^2 con valores altos de dicho parámetro.

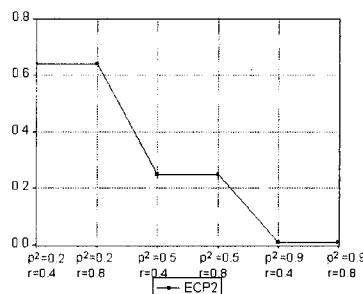


Gráfico 10. Representación de ECP_2 .

Los gráficos 11 y 12 se ocupan de representaciones semejantes pero con respecto a la medida PA_i . Se puede observar aquí que la multicolinealidad provoca que PA_4 aumente considerablemente, ofreciendo el peor resultado en cuanto a este criterio el coeficiente R^2_4 para valores de $r = 0.8$. En estos casos las medidas PA_3 y PA_5 resultan ser las más bajas. Sin embargo, para los casos en que $r = 0.4$, son inferiores las de PA_4 .

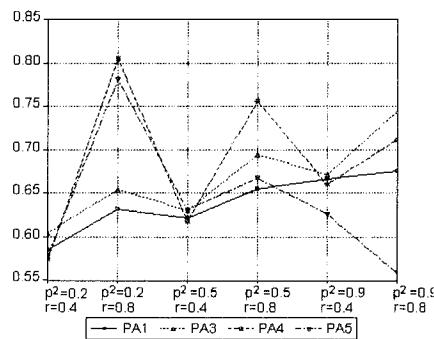


Gráfico 11. Representaciones de PA_1 , PA_3 , PA_4 y PA_5 .

La representación comparativa de las medidas SE_i , se presentan en los gráficos 13 y 14, donde se puede apreciar un mejor comportamiento generalizado desde este punto de vista para R^2_1 , siendo el peor en todos los casos el de R^2_4 , al obtenerse mayores valores del sesgo calculado.

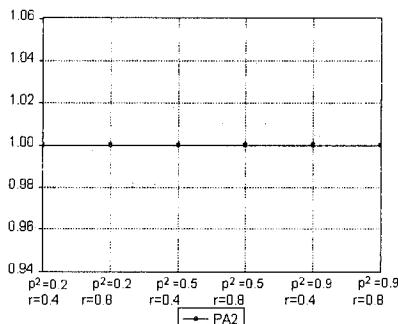


Gráfico 12. Representación de PA_2 .

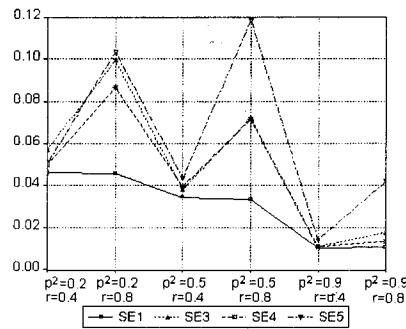


Gráfico 13. Representaciones de SE_1 , SE_3 , SE_4 y SE_5 .

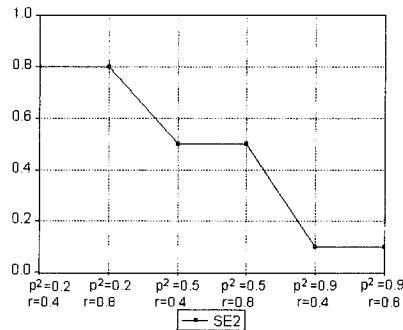


Gráfico 14. Representación de SE_2 .

7. CONCLUSIONES

Se extraen a continuación las conclusiones más relevantes en base a los resultados obtenidos.

- Quedan confirmados empíricamente los siguientes puntos:

- Los coeficientes R_1^2 , R_3^2 y R_5^2 no ofrecen resultados iguales cuando se aplican al modelo sin término independiente.

- El coeficiente R_1^2 toma valores inferiores a 0.
- El coeficiente R_5^2 toma valores superiores a 1.
- El problema que presentan R_1^2 y R_5^2 de no estar definidos entre 0 y 1, hace que se pierda la interpretación como tanto por uno de varianza explicada y por tanto se concluye que no son los coeficientes idóneos para su uso en el modelo sin término independiente.
- Las distribuciones de los coeficientes no son indiferentes al valor teórico P^2 , de modo que queda patente la influencia de este parámetro así como la de la multicolinealidad introducida en el modelo, según hemos podido apreciar en los resultados.
- El hecho de que se hayan obtenido todos los valores de PA_i mayores que 0,5, indica que existe un mayor peligro de sobrevalorar la adecuación del modelo que de subestimarla.
- Si se tiene en cuenta cómo se ha diseñado el P.G.D., se puede decir que las muestras generadas con un valor bajo de P^2 son aquellas para las que la varianza del error era grande en relación a la varianza teórica explicada que se denominó K . Esto ha provocado, en muestras de tamaño 15, el hecho de que la variable endógena explicada no estuviera próxima a la observada. Sin embargo, el modelo que se ha especificado en el experimento era exactamente igual al teórico, de forma que la hipótesis nula de anulación de los parámetros siempre debería de ser rechazada, puesto que nunca se cumplía.

En relación con esto, se extrae una conclusión importante del comportamiento de los coeficientes calculados. Los coeficientes R_1^2 , R_3^2 , R_4^2 , y R_5^2 , captan perfectamente el valor de P^2 , es decir, que detectan la falta de adecuación de la variable endógena observada con la explicada y, por tanto, podemos decir que serían buenos para tomar decisiones de cara a la predicción. Sin embargo, el coeficiente R_2^2 es indiferente al valor de P^2 , ya que ofrece siempre buenos resultados indicando fielmente que el modelo se ha generado con parámetros distintos de 0. Esto se explica perfectamente dada su relación con la prueba F de significación global. Presenta, en cambio, el problema de no detectar la relación entre la varianza del error y la explicada. Nos podría llevar, por tanto, a conclusiones demasiado optimistas en pequeñas muestras, siendo mayor el riesgo de sobrevaloración para valores pequeños de P^2 .

- En consecuencia, de todo lo anterior pensamos que los mejores coeficientes para analizar la bondad del modelo son R_3^2 y R_4^2 , teniendo en cuenta además que la información aportada por R_2^2 ya la tenemos con la prueba F .
- En cuanto a discriminar entre R_3^2 y R_4^2 concluimos que, en lo que respecta a la investigación efectuada, no hemos encontrado razones suficientes para decidir cual se comporta mejor dentro de los límites del experimento planteado, que supone el inicio de un proyecto mucho más ambicioso. Concretamente, estamos preparando

un análisis en el contexto de plantear un error de especificación y estudiar la relación de los coeficientes con otras medidas de bondad del modelo.

8. AGRADECIMIENTOS

Quiero mostrar mi agradecimiento a D. José Angel Roldán Casas por su colaboración en la revisión de paquetes econométricos y en la realización de las gráficas del presente trabajo.

Agradezco igualmente las sugerencias de tres evaluadores anónimos.

REFERENCIAS

- [1] **Akaike, H.** (1970). «Statistical Predictor Identification». *Annals of Institute Stat. Math.*, **22**, 203-217.
- [2] **Akaike, H.** (1974). «A new look at Statistical Model Identification». *IEEE Trans. Auto. Control*, **19**, 716-723.
- [3] **Barten, A.P.** (1987). «The coefficient of determination for regression without a constant term». *The Practice of Econometrics*. Ed. R.D.H. Heijman y H. Neudecker, 181-189.
- [4] **Chong, Y.Y. y Hendry, D.F.** (1986). «Econometric evaluation of linear macroeconomic models». *Review of Economic Studies*, **53**, 671-690.
- [5] **Clements, M.P. y Hendry, D.F.** (1991). «On the invalidity of mean square error forecast comparisons in economics». *Institute of Economics and Statistics and Nuffield College*, Oxford University, Oxford (mimeo).
- [6] **Cramer, J.S.** (1984). «Sample size and R^2 », *Discussion paper AE N2/84 of Faculty of Actuarial Science and Econometrics of the University of Amsterdam*.
- [7] **Davidson, R. y Mackinnon, J.G.** (1981). «Several tests for model specification in the presence of alternative hypotheses». *Econometrica*, **49**, 781-793.
- [8] **Dhrymes Phoebus J.** (1984). *Econometría*. Ed. AC. Madrid.
- [9] **Ebbeler, D.H.** (1975). «On the Probability of Correct Model Selection Using the Maximum R^2 Choice Criterion». *International Economic Review*, **16**, 516-521.
- [10] **Ericsson, N.R.** (1989). «Mean square error and forecast encompassing». *Discussion Paper*, International Finance Division, Board of Governors of the Federal Reserve System.

- [11] **Gorman, J.W. y Toman, R.J.** (1966). «Selection of Variables for Fitting Equations to Data». *Techometrics*, **8**, 27–51.
- [12] **Greene, W.H.** (1993). *Econometric Analysis*. Ed. Macmillan. New York.
- [13] **Hannan, E.J. y Quinn, B.** (1979). «The Determination of the Order of an Autoregression». *J. Royal Stat. Society, series B*, **41**, 190-195.
- [14] **Heijmans, R.D.H. y Neudecker, H.** (1987). «The coefficient of determination revisited». *The Practice of Econometrics*, Ed. R.D.H. Heijmans y H. Neudecker, 191-204.
- [15] **Hendry, D.F.** (1984). «Monte Carlo Experimentation in Econometrics» en Griliches, Z. and Intriligator, M.D. (eds) *Handbook of Econometric*, Volume II. Elsevier Science Publishers BV. North-Holland.
- [16] **Judge, G.G., Griffiths, W.E., Hill, R.C. Lütkepohl, H. y Lee, T.C.** (1985). *The Theory and Practice of Econometrics*, Ed. Wiley, New York.
- [17] **Kendall, M.G.** (1960). «The evergreen correlation coefficient, in: Contributions to probability and statistics». *Essays in Honor of Harold Hotelling*. Ed. I. Olkin a.o. Stanford : Stanford University Press, 274-277.
- [18] **Koerts, J. y Abrahamse, A.P.J.** (1970). «The correlation coefficient in the general linear model». *European Economic Review*, **1**, 401-427.
- [19] **Maddala, G.S.** (1988). *Introduction to Econometrics*. Ed. Macmillan. Londres.
- [20] **Mallows, C.L.** (1973). «Some Comments on C_p ». *Technometrics*, **15**, 661–675.
- [21] **Mizon, G.E.** (1984). «The encompassing approach in econometrics», en Hendry, D. F. y Wallis, K.F. (eds), *Econometrics and Quantitative Economics*. Ed. Basil Blackwell, Oxford.
- [22] **Mizon, G.E. y Richard, J.F.** (1986). «The encompassing principle and its application to testing non-nested hypothesis». *Econometrica*, **54**, 657-678.
- [23] **Peña Sanchez de Rivera, D.** (1989). *Estadística Modelos y Métodos 2. Modelos lineales y series temporales*. 2^a Edición revisada. Ed. Alianza, Madrid.
- [24] **Ramanathan, R.** (1992). *Introductory Econometrics with Applications*. Ed. Harcourt Brace Jovanovich, Fort Worth, Texas.
- [25] **Ramanathan, R.** (1993). *Statistical Methods in Econometrics*. Ed. Academic Press, San Diego, California.
- [26] **Schmidt, T.** (1973). «Calculating the Power of the Minimum Standard Error Choice Criterion». *International Economic Review*, **XIV**, 253-255.
- [27] **Schwarz, G.** (1978). «Estimating the Dimension of a Model». *Annals of Stat.*, **6**, 461–464.

- [28] **Shibata, R.** (1981). «An Optimal Selection of Regression Variables». *Biometrika*, **68**, 45–54.
- [29] **Theil, H.** (1971). *Principles of Econometrics*. Ed. North-Holland, Amsterdam.

Referencias de paquetes estadísticos

TSP. 4.2 A. TSP International. 1991.
MICRO TSP. 7.03. David M. Lilien. 1990.
ECONOMETRIC VIEWS. 1.1 C . David M. Lilien. 1994.
PC GIVE . 6.01. David F. Hendry. 1988.
BMDP. 7.0. BMDP Statistical Software. 1993.
BMDP NS. 1.1. BMDP Statistical Software. 1994.
STATGRAPHICS. 6.0 . Statistical Graphics Sistem. 1994.
PC RATS. 4.00. Tomas A. Doan. 1992.
SHAZAM. 6.2. K. J. White. 1990.
ESTATISTICA . 4.1. Statsoft. 1993.

ENGLISH SUMMARY

THE LINEAR MODEL WITHOUT A CONSTANT TERM AND THE COEFFICIENT OF DETERMINATION. A MONTE CARLO STUDY

RAFAELA DIOS PALOMARES*

Universidad de Córdoba

In the present work a Monte Carlo experiment has been done in order to compare the empirical performance of five different expressions for the coefficient of determination in the linear model without intercept. All of these have been calculated introducing a known value of P_2 , which may be considered as the fraction of the population variance of the dependent variable explained by the variation of the regressors. A given level of multicollinearity has been also introduced between the regressors. The results reveal that the best coefficients for the measure of goodness of fit in this case are R_3^2 (Heijmans y Neudecker, 1987) y R_4^2 (Barten, 1987).

Keywords: Coefficient of determination, goodness of fit, lineal model without an intercept, Monte Carlo method.

AMS Classification: (MSC): 62J20

* Rafaela Dios Palomares. Dpto. de Estadística e Investigación Operativa. Escuela Técnica Superior de Ingenieros Agrónomos y de Montes de la Universidad de Córdoba.

-Received May 1996.

-Accepted October 1997.

The commonly used expressions for the coefficient of determination are somewhat faulty as a measure of goodness of fit in regressions without a constant term. They can give negative values for R^2 or values larger than unity.

The regression model considered here is written as

$$y = Z\beta + u$$

where the matrix Z does not have a column with all elements equal to one. The best linear unbiased and consistent estimator of β is

$$b = (Z'Z)^{-1}Z'y \quad \text{and the vector of residuals is} \quad \hat{u} = y - Zb.$$

Let $\mathbf{1}$, A and M be the vector $\mathbf{1} = (1, 1, 1, \dots, 1)'$ and the matrices $A = I - (1/T)\mathbf{1}\mathbf{1}' = I - \mathbf{1}(\mathbf{1}\mathbf{1})^{-1}\mathbf{1}'$ and $M = (1/T)Z'AZ$, respectively.

In order to establish the parent counterpart of R^2 we follow Cramer (1984) and use the value to which the random variable

$$R^2 = \frac{b'Z'AZb}{y'Ay}$$

converges in probability for $T \rightarrow \infty$.

Assuming that $M_L = \text{plim } M = \lim M$ for $T \rightarrow \infty$ we have the following expression

$$\text{plim } R^2 = \frac{B'M_L\beta}{\beta'M_L\beta + \sigma^2} = P^2$$

So P^2 may be considered as a fraction of the population variance of the dependent variable explained by the variations of the regressors.

Barten (1987) have proposed four good properties for the coefficient of determination

- a) $\text{plim } R^2 = P^2$
- b) $0 \leq R^2 \leq 1$,
- c) Si $b = 0$, $R^2 = 0$,
- d) Si $\hat{u} = 0$, $R^2 = 1$.

These properties are the ones which one would like to see satisfied also by the coefficient of determination for regressions without intercept.

The econometric literature, as far as consulted by the author, presents the following five expressions for the coefficient of determination in this case.

$$R_1^2 = 1 - \frac{\hat{u}' \hat{u}}{y' A y}, \quad R_2^2 = 1 - \frac{\hat{u}' \hat{u}}{y' y}, \quad R_3^2 = \frac{(y' A \hat{y})^2}{(y' A y)(\hat{y}' A \hat{y})}$$

$$R_4^2 = \frac{(\hat{y}' A \hat{y})}{(\hat{y}' A \hat{y}) + \hat{u}' \hat{u}}, \quad \text{and} \quad R_5^2 = \frac{\hat{y}' \hat{y} - T \bar{y}^2}{y' A y}.$$

One can easily verify that only R_3^2 and R_4^2 meet properties *a*) through *d*).

In order to study the empirical performance of all of these statistics Monte Carlo simulations have been used where the DGP considered was

$$y_t = \beta_1 z_{1t} + B_2 z_{2t} + u_t, \quad \text{para } t = 1, \dots, T$$

$$y \ u \approx N(0_T, \sigma^2 I_T).$$

All simulations were carried for different values for P^2 and the multicolineality level which lie in $[0, 1]$ using $T = 15$ and 1000 replications.

The results reveal that the best coefficients for the measure of goodness of fit in this case are R_3^2 (Heijmans y Neudecker, 1987) y R_4^2 (Barten, 1987).

UN PROCEDIMIENTO PARA OBTENER CLUSTERS UTILIZANDO LA D.V.S. DE UNA MATRIZ. COMPARACIONES CON EL BIPILOT Y CON EL MODELO Q-FACTORIAL

JUAN L. GONZÁLEZ CABALLERO*

MARIANO J. VALDERRAMA BONNET**

Durante las últimas décadas, el análisis de un conjunto de n individuos medidos en p variables, proporcionando una matriz de datos $X_{n,p}$, mediante técnicas de representación que utilizan la Descomposición en Valores Singulares (DVS) de la matriz $X_{n,p}$ (o alguna derivada), han permitido resumir la información que aportan los datos en alguna forma óptima, siendo muy útil para indicar la presencia de clusters entre los n individuos y/o para prevenir ante posibles clasificaciones erróneas producidas por técnicas de agrupamiento más complejas. En este artículo estudiaremos un procedimiento que puede utilizarse en ocasiones para obtener clasificaciones naturales de un conjunto de datos, basado en la representación biplot y en el modelo Q-factorial que puede obtenerse a partir de la DVS.

A procedure of clustering using the SVD of a matrix. Comparisons with the biplot and with the Q-factor model.

Palabras clave: Descomposición en valores singulares; modelos factoriales; representación biplot; varianza generalizada; procedimientos de cluster no jerárquicos.

Clasificación AMS (1991): 62H25, 62H30.

* Juan L. González Caballero. Dpto. de Matemáticas. Facultad de Medicina. Universidad de Cádiz.

** Mariano J. Valderrama Bonnet. Dpto. de Estadística e I.O. Facultad de Farmacia. Universidad de Granada.

– Recibido en mayo de 1996.

– Aceptado en septiembre de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

La Descomposición en Valores Singulares (DVS) de una matriz $X_{n,p}$ de rango r ($\leq p < n$) es un resultado descrito por primera vez por el matemático inglés Sylvester [20], que permite descomponer X como

$$(1) \quad X = V\Lambda U',$$

donde $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r)$ es una matriz diagonal donde $\lambda_1^2, \dots, \lambda_r^2$ son los autovalores positivos de $X'X$, $U = [u_1, \dots, u_r]$ es la matriz de autovectores ortonormales de $X'X$ y $V = [v_1, \dots, v_r]$ es la matriz de autovectores ortonormales de XX' , correspondientes a los autovalores $\lambda_1^2, \dots, \lambda_r^2$.

Su importancia estadística se debe a Eckart y Young [3] y Householder y Young [13], que mostraron que si $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_r$, el mejor ajuste en el sentido de mínimos cuadrados de la matriz X por una de rango $q \leq r$ viene dado por la matriz

$$(2) \quad X_{(q)} = V_{(q)}\Lambda_{(q)}U'_{(q)},$$

con $\Lambda_{(q)} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_q)$, $U_{(q)} = [u_1, \dots, u_q]$ y $V_{(q)} = [v_1, \dots, v_q]$, es decir, $X_{(q)}$ minimiza

$$\|X - M\|^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p (x_{ij} - m_{ij})^2.$$

Además, una medida absoluta de la bondad de este ajuste puede definirse por la proximidad a 1 de

$$(3) \quad \|X_{(q)}\|^2 / \|X\|^2 = \sum_{\alpha=1}^q \lambda_\alpha^2 / \sum_{\alpha=1}^r \lambda_\alpha^2.$$

La DVS, o la descomposición espectral de una matriz simétrica que es un caso particular de DVS, es el fundamento de muchas de las técnicas de reducción y representación de datos, como el análisis de componentes principales, que pueden verse, por ejemplo, en Jolliffe [17] o Jackson [14], y el de coordenadas principales en Cuadras [2], algunos modelos factoriales descritos, por ejemplo, en Reyment y Jöreskog [19] o en Jambu [15], el análisis de correspondencias, descrito por Greenacre [11], ó la técnica de representación biplot, iniciada por Gabriel [7], entre otras.

En los últimos años pueden encontrarse numerosas referencias en la literatura sobre Análisis Cluster (Gnanadesikan [9], Gordon [10], Everitt [4]), en las que se sugieren el empleo de procedimientos geométricos de representación de los datos que, en la mayoría de los casos, se refieren a alguna de las técnicas mencionadas anteriormente. Aunque ninguna de ellas está específicamente diseñada para indicar la presencia de

clusters, se utilizan para este propósito conjuntamente con otros procedimientos de obtención de grupos homogéneos, no sólo para indicar su presencia sino también para prevenir ante pretensiones excesivas de grupos producidas por procedimientos más complejos.

En este artículo pretendemos utilizar la DVS para proponer un procedimiento geométrico que permita obtener clusters naturales dentro de un conjunto de datos. Este procedimiento está inspirado en las representaciones geométricas que el biplot y, sobre todo, el modelo factorial, permiten hacer de cualquier conjunto de individuos.

2. EL MODELO DE REPRESENTACIÓN BI PLOT

El biplot es un modelo de representación basado en la descomposición (1), que fue introducido por Gabriel [7] y relacionado también posteriormente por Greenacre [11] con el análisis de correspondencias. Dada una matriz de datos $X_{n,p}$ (n individuos y p variables), el biplot proporciona una descripción conjunta, exacta o aproximada según el rango de X , de los n individuos y las p variables en dos dimensiones.

A partir de la descomposición (1), puede definirse una matriz diagonal Λ^α con $0 \leq \alpha \leq 1$, cuyos elementos sean $\lambda_1^\alpha, \dots, \lambda_r^\alpha$, y otra similar $\Lambda^{1-\alpha}$ para formar las matrices

$$(4) \quad G = V\Lambda^\alpha, \quad H' = \Lambda^{1-\alpha}U'.$$

Estas dos matrices permiten expresar X como

$$(5) \quad X = G \cdot H',$$

lo cual es equivalente a que cada elemento de X se pueda escribir como

$$(6) \quad x_{ij} = g_i^t \cdot h_j, \quad i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, p$$

siendo g_i y h_j los vectores formados por las filas de G y H respectivamente.

Si, como hemos supuesto en la introducción, el rango de X es r , los vectores g_i y h_j tienen r componentes, permitiéndonos obtener una representación conjunta de las n filas y las p columnas de la matriz X en un espacio r -dimensional. Gabriel [7] denomina a los vectores g_i ‘efectos fila’ y a los h_j ‘efectos columna’ que intervienen de forma multiplicativa en cada elemento x_{ij} de X .

En el caso de que X tenga rango 2, esta representación puede hacerse en el plano, con las consiguientes ventajas de interpretación, denominándose a este tipo de representación *biplot* de X . En general, si $\text{rg}(X) > 2$, las propiedades mínima cuadráticas de la descomposición (1) nos permiten obtener una representación aproximada de X en el

plano, tomando las dos primeras componentes de g_i y h_j . Este tipo de aproximación puede ser utilizada también para la representación en espacios de dimensión mayor que 2, aunque éstas sean menos claras desde el punto de vista gráfico. Gabriel [8] se refiere a ellas como *bimodels*, reservando el término biplot para la representación en dimensión 2.

La no unicidad en la obtención del biplot de X dada por el escalar α en la definición de G y H en (4), puede evitarse dando valores particulares de α o imponiendo condiciones al modelo gráfico obtenido con los vectores g_i y h_j .

El biplot que más información puede darnos en cuanto a las relaciones entre las filas (individuos) de X , con vistas al descubrimiento de posibles grupos entre ellos, es el que se obtiene para $\alpha = 1$. Con este valor se tiene

$$(7) \quad G = V_{(2)}\Lambda_{(2)}, \quad H' = U'_{(2)},$$

que verifica

$$(8) \quad H'H = I_2$$

Este biplot, además de (6), verifica que (Gabriel, [7]):

$$(9) \quad XX' = GG',$$

es decir, las relaciones entre las filas de X respecto de la métrica euclídea, pueden ser representadas por las de los vectores g con la misma métrica. Esta relación (9) permite obtener, para dos filas cualesquiera x_i y x_k de X , que:

$$(10) \quad x'_i x_k \sim g'_i g_k,$$

$$(11) \quad \|x_i\| \sim \|g_i\|,$$

$$(12) \quad \cos(x_i, x_k) \sim \cos(g_i, g_k),$$

$$(13) \quad \|x_i - x_k\| \sim \|g_i - g_k\|$$

indicando (x, y) el ángulo entre los vectores x e y .

Las propiedades anteriores pueden ser utilizadas al inspeccionar el biplot definido por (7) cuando se pretenden encontrar clusters entre las filas de X . En concreto, vamos a analizar el ejemplo que nos proporcionan los conocidos datos de los tres tipos de Iris que Fisher [5] utilizó por primera vez en problemas de discriminación. Como se sabe, estos datos consisten en las medidas de las longitudes y anchuras (en mm.) de los sépalos y pétalos de 150 especímenes de plantas de Iris. Fueron utilizadas 50 plantas de cada uno de los tres tipos de Iris Setosa, Versicolor y Virgínica, aunque nosotros sólo utilizaremos aquí las 10 primeras plantas (Tabla 1) para analizar un conjunto más manejable. En ella se han ordenado los datos de forma que las 3 primeras flores

son del Tipo Setosa (A), las 3 siguientes del Tipo Versicolor (B) y las 4 últimas del Tipo Virgínica (C), como se aprecia en la última columna. Esta clasificación será ignorada en principio, pero nos ayudará posteriormente para ir analizando los resultados obtenidos.

Tabla 1. Las 10 primeras flores Iris utilizadas por Fisher (1936)

IRIS	Long. Sepa.	Anch. Sepa.	Long. Peta.	Anch. Peta.	Tipo Iris
1	50	33	14	02	A
2	46	34	14	03	A
3	46	36	10	02	A
4	65	28	46	15	B
5	62	22	45	15	B
6	59	32	48	18	B
7	64	28	56	22	C
8	67	31	56	24	C
9	63	28	51	15	C
10	69	31	51	23	C

La Figura 1 muestra el biplot definido por (7) para la matriz $X_{10,4}$ de la Tabla 1 cuando se utilizan los datos centrados, es decir, medidos respecto de la media de cada columna. Es evidente que esta transformación no cambia las distancias relativas entre las flores. Se han representado las filas mediante el correspondiente número y las columnas mediante las correspondientes direcciones.

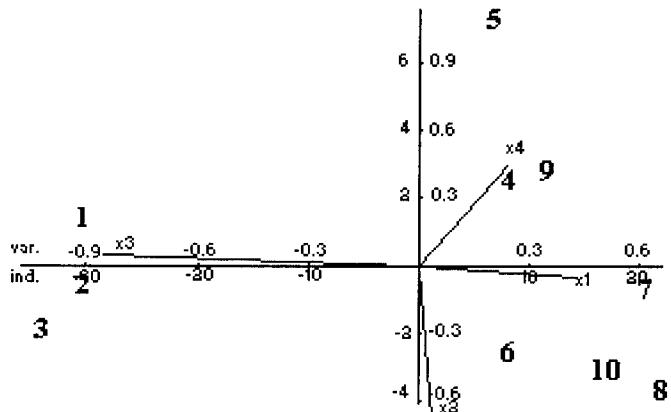


Figura 1. Biplot de los datos Iris centrados por columnas.

La inspección del biplot de la Figura 1 sólo nos permite descubrir una diferencia clara entre las flores del tipo A y las de los tipos B y C. Entre las flores de estos dos últimos tipos se aprecian ligeras diferencias, pero éstas no permiten obtener resultados claros en cuanto a posibles agrupaciones entre ellas, ni en cuanto a que coincidan estas agrupaciones con la clasificación de tipos.

Debe notarse que cualquier procedimiento que se utilice para formar clusters entre los individuos de un conjunto, debe partir de una medida de proximidad entre los individuos (distancia, disimilaridad, similaridad, etc.), y de una técnica clasificatoria (jerárquica, no jerárquica, etc.) que mediante un algoritmo apropiado obtenga los grupos.

En este caso, la medida de proximidad que estamos utilizando es la distancia euclídea entre los individuos, cuya representación aproximada nos proporciona el biplot, y cuyo cuadrado puede expresarse, en virtud de la regla del paralelogramo, como

$$(14) \quad \begin{aligned} d_{ik}^2 &= d_i^2 + d_k^2 - 2 \cdot d_i \cdot d_k \cdot \cos\theta_{ik} \\ &= (d_i - d_k)^2 + 2 \cdot d_i \cdot d_k \cdot (1 - \cos\theta_{ik}) \end{aligned}$$

donde hemos llamado a $\|x_i - x_k\| = d_{ik}$, $\|x_i\| = d_i$ y $\|x_k\| = d_k$, siendo $\|\cdot\|$ la norma euclídea y θ_{ik} el ángulo que forman los vectores x_i y x_k . La igualdad (14) significa que la distancia entre dos individuos cualesquiera depende de la diferencia entre sus distancias al origen y del ángulo que forman. Dos individuos estarán próximos cuando sus distancias respectivas al origen sean muy parecidas y, además, el ángulo que formen sea próximo a 0° . En el biplot de la Figura 1, las flores 1 y 2 están próximas porque distan del origen aproximadamente lo mismo y forman un ángulo próximo a 0° , en cambio, las flores 5 y 8 no están próximas porque aunque distan del origen aproximadamente lo mismo, el ángulo que forman es próximo a 120° , y tampoco están próximas las flores 6 y 8 aunque formen un ángulo próximo a 0° ya que tienen distancias al origen distintas.

La técnica clasificatoria debe actuar en base a las distancias entre los individuos y, por tanto, teniendo en cuenta las diferencias entre sus normas y los ángulos que forman. Es evidente que aunque el biplot es capaz de representar bien estas relaciones, esto no es suficiente para proporcionar una regla clara de clasificación entre los individuos. La decisión sobre el número de grupos y sobre la asignación de los elementos a cada grupo necesita algo más que la simple inspección de una representación biplot.

3. LOS MODELOS FACTORIALES EN MODO R Y Q

Reyment y Jöreskog [19] y Jambu [15], describen que la descomposición (1) permite también, dada la matriz de datos $X_{n,p}$, obtener un conjunto de direcciones principales

que recojan en orden decreciente la máxima variabilidad, tanto en el espacio de los individuos (\mathbb{R}^p) como en el de las variables (\mathbb{R}^n), considerados aquéllos y éstas como puntos o vectores dentro de dichos espacios, con coordenadas las filas o las columnas de X .

3.1. El modelo factorial para variables

En concreto, para la matriz $X_{n,p}$ previamente centrada por columnas, puede obtenerse un modelo factorial para las variables (o en modo R) de la forma

$$(15) \quad X_{n,p} = F_{n,q} \cdot (A_{p,q})' + E_{n,p}$$

tomando $F = V_q$ y $A = U_q \cdot \Lambda_q$. La matriz F representa por columnas un conjunto de variables ideales o factores, siendo las filas de F las puntuaciones que alcanzan los individuos en ellos. La matriz A se denomina matriz de pesos o cargas factoriales, y sus elementos permiten cuantificar la relación entre las variables originales y los factores. Por último, la matriz E o de términos error, representa la información contenida en X que no es capaz de explicar el conjunto de factores de F .

Desde el punto de vista geométrico, el modelo (15) escrito sin la matriz E

$$(16) \quad X_{n,p} \approx F_{n,q} \cdot (A_{p,q})'$$

representa que cada variable puede escribirse como combinación lineal de los factores extraídos, es decir, el conjunto de variables podría considerarse que, salvo errores, está contenido en un subespacio de dimensión q cuya base ortonormal la forman los q factores. Nótese que la elección del número de factores no tiene por qué ser dos o tres.

Aunque la formulación (15) del modelo factorial no cumple con las hipótesis del modelo clásico en lo que se refiere a los factores específicos ([12]), sí lo hace en cuanto a los factores comunes, ya que la matriz de covarianzas S verifica que:

$$(n - 1) \cdot S = X'X \approx AA'$$

La solución (15) es una de las técnicas más utilizadas para extraer una primera solución factorial ortogonal, de la que, posteriormente, pueden derivarse otras realizando rotaciones ortogonales u oblicuas con ella.

Conviene notar que, básicamente, los criterios analíticos que se utilizan para realizar las rotaciones están inspirados en las condiciones dadas por Thurstone [21] para obtener una estructura factorial más simple. Tanto si los factores rotados siguen siendo ortogonales como si se obtienen factores oblicuos, los *criterios de estructura simple de Thurstone* pretenden convertir los factores originales en otros que pasen,

aproximadamente por los posibles clusters de variables, de forma que cada una tenga pesos muy altos (positivos o negativos) en uno de los factores y prácticamente nulos en el resto (Cuadras, [2], pp. 169-173). Esta idea de agrupación de las variables a través de los factores es la que trataremos de utilizar para hacer lo mismo con los individuos de un conjunto, en el que se sospeche la existencia de grupos naturales.

3.2. El modelo factorial para individuos

Al igual que se hizo con las variables, puede pensarse en obtener de (1) un modelo factorial para los individuos (o en modo Q) de la forma

$$(17) \quad X_{n,p} = B_{n,q} \cdot (G_{p,q})' + E_{n,p}$$

tomando $B = V_q \cdot \Lambda_q$ y $G = U_q$, donde B , G y E representan lo mismo que en el modelo para variables, cambiando éstas por los individuos.

También en este caso, el modelo (17) escrito sin el término error E

$$(18) \quad X_{n,p} \approx B_{n,q} \cdot (G_{p,q})'$$

representa geométricamente que pueden encontrarse q factores (individuos ideales) respecto de los cuales los n individuos iniciales pueden expresarse como combinación lineal de ellos.

Debemos notar que al igual que en el modelo R-factorial la matriz de pesos A se obtuvo a partir de la descomposición espectral de $X'X$, matriz que salvo una constante representa las covarianzas entre las variables, en el modelo Q-factorial la matriz de pesos B se obtiene de la descomposición de XX' , que representa los productos escalares de los vectores fila de X .

Además, de la forma de extraer la matriz de pesos B en (17) y la relación (2) se deduce que

$$B = X \cdot U_q,$$

es decir, inicialmente los elementos de B representan las coordenadas de los vectores fila de X respecto del sistema de autovectores U_q y, por tanto, esta matriz B representa los cosenos de los ángulos que forman cada individuo con cada factor (cosenos directores), multiplicados por las longitudes de tales vectores, es decir, si es x_i el vector de \mathbb{R}^p que representa al individuo i ,

$$\begin{aligned} b_{i,j} &= \text{coordenada de } x_i \text{ en la dirección } u_j \\ &= \cos \theta_{i,j} \cdot \|x_i\| \end{aligned}$$

con $\theta_{i,j}$ el ángulo que forma el vector x_i con el vector u_j .

Por otra parte, el modelo Q-factorial nos va a permitir rotar los factores, ortogonal u oblicuamente, con los mismos criterios utilizados con las variables (Cuadras, [2]), para obtener factores nuevos que determinen, aproximadamente, los posibles clusters existentes dentro del conjunto de individuos. Cuando se transforman los factores mediante rotaciones, en general oblicuas, la nueva matriz B^r (matriz de pesos rotada) sigue teniendo el mismo significado en cuanto a las coordenadas respecto de los nuevos factores, sin embargo no sirve para obtener los cosenos directores. Es necesario para estos casos definir una nueva matriz asociada al modelo factorial, denominada matriz de estructura factorial $S_{n,q}$, en la que sus elementos representan tales cosenos multiplicados por las longitudes de los vectores fila de X . La relación entre ambas matrices viene dada por

$$(19) \quad S_{n,q} = B_{n,q}^r \cdot \Theta_{q,q}$$

con $\Theta_{q,q}$ matriz de cosenos de los ángulos que forman los factores. Claramente, si $\Theta_{q,q} = I$ en el caso ortogonal, $S_{n,q} = B_{n,q}^r$.

Todo lo comentado anteriormente para las matrices de pesos y estructuras tiene la misma validez si partimos de una matriz de datos W en la que los vectores fila w_i son los de la matriz X normalizados. Los elementos de la matriz WW' son ahora los cosenos de los ángulos que forman cada pareja de filas de W o de X . Con la descomposición espectral de WW' se obtiene una nueva matriz de pesos, que seguiremos llamando B , y si aplicamos una rotación oblicua obtendremos las matrices B^r y S , siendo ahora los elementos de S los cosenos directores de los vectores fila de X respecto de los factores respectivos. Estos cosenos directores oscilarán entre -1 y 1, y tienen un significado claro en cuanto al grado de asociación de cada individuo con cada factor, de forma que podrían utilizarse para obtener una clasificación de los individuos según el factor al que se asocien con valores próximos a los extremos.

Hay que aclarar que el modelo Q-factorial obtenido al normalizar las filas de X no tiene una relación fácil de expresar respecto al que se obtiene con el obtenido sin normalizarlas. Lo que ocurre es algo parecido al problema de obtener las componentes principales de un conjunto de variables antes y después de su tipificación, es decir, con la matriz de covarianzas o con la de correlaciones. Los argumentos sobre la homogenización de la dispersión de las variables para usar la tipificación o la recomendación de que no se tipifiquen cuando tengan dispersiones parecidas, pueden considerarse con los individuos en cuanto a las normas euclídeas que presentan las filas de X .

A pesar de lo expuesto hasta ahora, el procedimiento que pasa por obtener el modelo Q-factorial de la matriz W , no es tampoco lo suficientemente adecuado para detectar las diferencias entre algunos clusters. Concretamente, pueden encontrarse ejemplos de conjuntos de datos (Figura 2) en los que, existiendo grupos, un análisis factorial en modo Q por el procedimiento expuesto antes no detectaría algunos de ellos. Sim-

lemente, el hecho de que exista más de un grupo (clusters 1 y 2) en alguna de las direcciones de máxima variabilidad, hará que el factor que determine tal dirección aglutine a todos los grupos que se encuentran en dicha dirección. También puede ocurrir que existan grupos de elementos (cluster 3) en los que todas las direcciones principales «pesen» por igual.

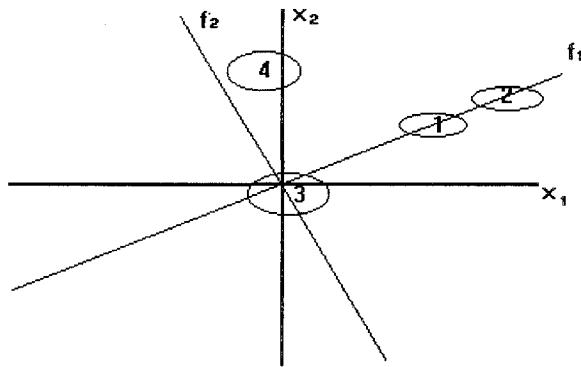


Figura 2. Ejemplo de conjunto de datos con grupos naturales entre los que algunos no pueden ser detectados con las asociaciones que establece el modelo Q-factorial con la matriz normalizada por filas.

Lo que ocurre en estos casos puede ser debido, por una parte, a que los individuos forman ángulos muy parecidos entre sí aunque tienen normas muy diferentes (en los casos 1 y 2) y, por tanto, los elementos de la matriz de estructuras asocian al mismo factor a individuos de clusters diferentes y, por otra, a que los individuos tienen normas muy parecidas y pequeñas en relación al resto, pero forman ángulos muy distintos (en el caso 3) y, por tanto, los elementos de la matriz de estructuras asocian a los individuos de un cluster a varios factores a la vez.

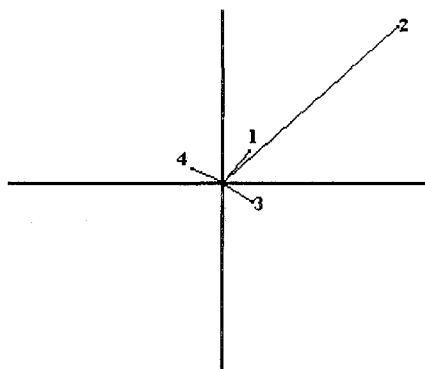


Figura 3. Ejemplos de datos que clasificaría mal el modelo Q-factorial con la matriz normalizada por filas.

La figura 3 aclara lo anterior. Los individuos representados por el vector 1 y 2 forman un ángulo próximo a 0° y, por tanto, tendrán un coeficiente de asociación próximo a 1 que hará que queden asociados al mismo factor, a pesar de que sus diferencias de longitud debería clasificarlos en factores distintos. Los individuos 1, 3 y 4 forman ángulos muy diferentes, pero sus longitudes son parecidas y pequeñas en relación a otras, lo cual aconsejaría que estuvieran asociados al mismo factor.

En el caso de las flores Iris, centradas por columnas, analizadas en la sección anterior, la Tabla 2 representa los valores de la matriz B obtenidos para el modelo (17) cuando se toman los 4 factores posibles y los valores singulares correspondientes. Nótese que si representamos las flores respecto de los 2 primeros factores obtendremos el biplot de la Figura 1. Además, la penúltima fila de la tabla indica el tanto por ciento de la variabilidad total que es capaz de explicar cada factor y la última el que explican los q primeros según (3). Por ejemplo, el biplot de la Figura 1 representa el 98.46% de la variabilidad presente en los datos.

Tabla 2. Matriz de pesos iniciales B del modelo Q -factorial para los datos Iris centrados por columnas

Iris	Factor 1	Factor 2	Factor 3	Factor 4
I1	-29.27	-0.99	1.87	-0.69
I2	-30.50	0.61	-1.58	0.71
I3	-34.46	2.16	0.05	0.19
I4	8.67	-2.33	2.29	-1.71
I5	7.39	-7.34	0.27	2.18
I6	8.78	2.84	-3.70	-0.18
I7	19.33	0.36	-2.32	1.09
I8	20.88	3.74	0.47	0.45
I9	12.11	-2.53	-1.74	-2.66
I10	17.06	3.47	4.38	0.62
Val. sing.	66.56	10.30	7.27	4.20
% Var. expl.	96.16	2.30	1.15	0.39
% Var. acum.	96.16	98.46	99.61	100.00

Cualquier clasificación de las flores que queramos obtener analizando las asociaciones de la Tabla 2, deben tener en cuenta los dos parámetros (14) de los que dependen las distancias relativas entre las flores: las diferencias de distancias al origen y el ángulo que forman. En su lugar queremos que tal clasificación dependa sólo de un parámetro: el ángulo que forman.

Con el mismo ejemplo, si después de centrar por columnas se normalizan los datos por filas, la Tabla 3 nos muestra la matriz de pesos inicial obtenida por (17) para los tres primeros factores, así como los valores singulares y los porcentajes de variabilidad total que representan.

Tabla 3. Matriz de pesos inicial con los tres primeros factores para el modelo Q-factorial obtenido con los datos Iris, centrados por columnas y normalizados por filas

Iris	Factor 1	Factor 2	Factor 3
I1	-0.99	-0.08	0.04
I2	-0.99	-0.003	-0.06
I3	-1.00	0.02	-0.001
I4	0.93	-0.25	0.21
I5	0.71	-0.66	-0.15
I6	0.87	0.39	-0.27
I7	0.98	0.07	-0.11
I8	0.97	0.19	0.07
I9	0.96	-0.11	-0.13
I10	0.93	0.16	0.29
Val. sing.	2.98	0.87	0.52
% Var. expl.	88.6	7.5	2.7
% Var. acum.	88.6	96.1	98.8

Podemos ahora utilizar los 2 o 3 primeros factores, ya que en ambos casos el porcentaje de variabilidad explicada es alto, y aplicar un criterio de rotación oblicua para obtener direcciones que clarifiquen más la agrupación de los individuos.

En este caso hemos utilizado el criterio de rotación oblicua oblimín directo ([16]) y hemos representado en la Tabla 4 las matrices de estructuras obtenidas con los 2 primeros factores (izquierda) y con los 3 primeros factores (derecha).

Una simple inspección de ambas matrices de la Tabla 4 nos permite ver que los posibles grupos que pueden determinar los factores, buscando los elementos con valor absoluto más alto en cada individuo son, por un lado, el formado por las flores del grupo Setosa (I1, I2 y I3) que tienen una asociación alta con la dirección negativa del Factor 1 y, por tanto, cosenos directores próximos a -1. Por otro lado, las flores de los grupos Versicolor y Virgínica (I4, I6, I7, I8, I9 y I10) que se asocian al mismo factor 1 en su dirección positiva sin posibilidad clara de distinción entre los dos grupos, mientras que la flor I5 del grupo Versicolor quedaría asociada a la dirección negativa del Factor 2.

Tabla 4. Matrices de estructuras con dos y tres factores para el modelo Q-factorial con los datos Iris, centrados por columnas y normalizados por filas, con la clasificación obtenida según el mayor grado de asociación con los factores

Iris	Mat. de estr. (2 fact.)		Mat. de estr. (3 fact.)		
	Factor 1	Factor 2	Factor 1	Factor 2	Factor 3
I1	-0.99	0.53	-0.99	0.58	0.01
I2	-0.98	0.59	-0.98	0.62	-0.11
I3	-0.98	0.62	-0.98	0.65	-0.06
I4	0.87	-0.75	0.87	-0.74	0.34
I5	0.58	-0.94	0.58	-0.96	0.15
I6	0.93	-0.21	0.93	-0.31	-0.35
I7	0.99	-0.53	0.98	-0.59	-0.06
I8	0.99	-0.43	0.99	-0.46	0.05
I9	0.92	-0.66	0.92	-0.71	-0.03
I10	0.95	-0.44	0.96	-0.43	0.26

Aparece en este ejemplo el problema que comentábamos anteriormente, debido a que los dos grupos Versicolor y Virgínica están asociados al mismo factor porque están muy próximos respecto a los ángulos que forman entre ellos y, a la vez, con la dirección positiva del primer factor principal. Veremos si una transformación previa de los datos puede resolver este problema.

4. UN PROCEDIMIENTO QUE PERMITE OBTENER CLUSTERS

Los problemas comentados en la sección anterior pueden tener solución. En esta sección se propone un procedimiento de obtención de clusters a partir de los factores obtenidos en el modelo Q-factorial propuesto en (17), sobre una matriz $W_{n,p+1}$ obtenida al realizar ciertas transformaciones sobre la inicial $X_{n,p}$. Dichas transformaciones están orientadas a evitar los problemas de carácter geométrico que impedían establecer una asociación uno a uno entre las distancias originales entre individuos y el coeficiente de asociación obtenido entre ellos después de centrar por columnas y normalizar por filas la matriz de datos.

4.1. Preparación de los datos. Obtención de W

Partiremos de un conjunto de datos cualquiera $X_{n,p}$, donde las variables analizadas sean de tipo cuantitativo y en el que estudios previos realizados sobre ellos hayan determinado la existencia de posibles agrupaciones naturales.

Para tal matriz X , nuestro objetivo va a ser encontrar un conjunto de factores o individuos ideales tales que podamos generar con ellos, aproximadamente, el conjunto original de datos y, al mismo tiempo, nos permitan encontrar las posibles agrupaciones que existan entre ellos.

La idea sobre la que trabajaremos es la siguiente: si en los datos existen grupos homogéneos, y utilizamos la métrica euclídea para determinar la proximidad entre los puntos que representan a los individuos, una buena forma de detectarlos sería que pudiéramos «verlos» desde una perspectiva apropiada (fuera de la nube de puntos que determinan), que nos permita descubrirlos con las direcciones que desde este punto exterior pasen por los centros de tales grupos. Esta idea intuitiva vamos a concretarla realizando algunas transformaciones sobre X que, aunque en un primer momento distorsionan las distancias originales entre ellos, veremos que permiten clasificarlos de acuerdo a las distancias originales que presentan.

En primer lugar, seguiremos suponiendo que la matriz de datos X está centrada por columnas, lo cual permitirá situar a la nube de puntos en torno al origen de coordenadas de \mathbb{R}^p .

En segundo lugar, incluiremos la nube de puntos de \mathbb{R}^p en un espacio de una dimensión más, \mathbb{R}^{p+1} , añadiendo una columna de valores constante a X . Obtendremos una matriz

$$T = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} & \lambda \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} & \lambda \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} & \lambda \end{pmatrix}$$

donde la última columna representa que se ha efectuado una traslación en \mathbb{R}^{p+1} de cada vector que representa a los individuos mediante el vector $t = (0, \dots, 0, \lambda)$ del espacio \mathbb{R}^{p+1} , es decir, se desplazarán a través de la dimensión $p+1$ una longitud λ , de forma que este desplazamiento permita «ver» desde el origen los grupos homogéneos con mayor claridad.

En el tercer paso, normalizamos los vectores fila que representan a los individuos, para que las longitudes originales de cada vector fila no influyan en los elementos de la matriz de estructura. En este paso se obtienen las proyecciones de los vectores fila de T en la bola de radio unidad del espacio \mathbb{R}^{p+1} . La matriz que tiene por filas estas

proyecciones será

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1p} & w_{1,p+1} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2p} & w_{1,p+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ w_{n1} & w_{n2} & \cdots & w_{np} & w_{1,p+1} \end{pmatrix}$$

a la que le aplicaremos el modelo (17):

$$(20) \quad W_{n,p+1} \approx B_{n,q} \cdot (G_{p+1,q})'$$

La matriz B se obtiene ahora descomponiendo espectralmente WW' , cuyos elementos son los productos escalares entre cada dos filas y, por tanto, los cosenos entre los ángulos que desde el origen forman los individuos desplazados en \mathbb{R}^{p+1} . Veremos a continuación que estos cosenos van a estar cerca de 1 (6 -1) para individuos próximos respecto a la métrica euclídea y cerca de 0 para individuos alejados entre sí.

Proposición 1:

Sean dos puntos cualesquiera P_i y P_k de \mathbb{R}^p , llamemos θ_{ik} el ángulo que forman los vectores OP_i , OP_k y d_i , d_k sus normas. Supongamos que incluimos estos puntos en un espacio de dimensión $p+1$, desplazándolos a través de la dimensión $p+1$ una distancia $\lambda > 0$, siendo OP'_i y OP'_k los nuevos vectores desde el origen, α_{ik} el ángulo que forman y t_i , t_k sus normas. Entonces

1. Los valores del $\cos\alpha_{ik}$ pueden expresarse como

$$(21) \quad \cos\alpha_{ik} = \frac{\lambda^2 + h d_i^2 \cos\theta_{ik}}{\sqrt{d_i^2 + \lambda^2} \sqrt{h^2 d_i^2 + \lambda^2}}$$

siendo $d_k = h \cdot d_i$, para $h > 0$

2. Los valores del $\cos\alpha_{ik}$, que oscilan están -1 y 1, están próximos a 1 para puntos P_i y P_k , situados fuera de un entorno del origen, próximos entre sí.
3. Los valores del $\cos\alpha_{ik}$ son menores que $\cos\theta_{ik}$ cuando los puntos P_i y P_k , situados fuera de un entorno del origen, tienden a estar alejados.
4. Los valores del $\cos\alpha_{ik}$ están próximos a 1 para puntos P_i y P_k situados en un entorno del origen, independientemente del ángulo θ_{ik} que formen.

Demostración:

1. Ayudándonos de la Figura 4,

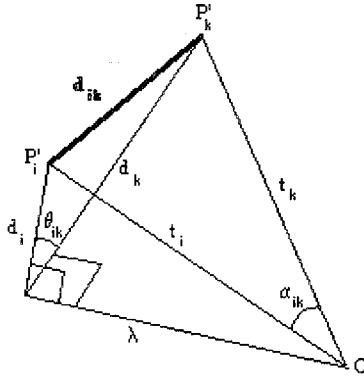


Figura 4. Representación de elementos desplazados en \mathbb{R}^{p+1} .

se tiene que la expresión (14) puede escribirse indistintamente como

$$(22) \quad \begin{aligned} d_{ik}^2 &= d_i^2 + d_k^2 - 2d_i d_k \cos\theta_{ik} \\ &= t_i^2 + t_k^2 - 2t_i t_k \cos\alpha_{ik}. \end{aligned}$$

Pero como $t_i^2 = d_i^2 + \lambda^2$ y $t_k^2 = d_k^2 + \lambda^2$, sustituyendo en (22) y simplificando, se obtiene

$$-2d_i d_k \cos\theta_{ik} = 2\lambda^2 - 2\sqrt{d_i^2 + \lambda^2}\sqrt{d_k^2 + \lambda^2} \cos\alpha_{ik}$$

de donde, sustituyendo d_k por $h \cdot d_i$ y despejando $\cos\alpha_{ik}$ se llega a la expresión (21).

2. Para cualquier desplazamiento $\lambda > 0$ de los puntos en la dirección $p+1$, sea un punto P_i no contenido en un entorno del origen de \mathbb{R}^p , es decir con distancia al origen $d_i > M$.

Los puntos próximos a P_i serán aquellos que estén en una cierta bola de centro P_i y radio $\epsilon : B^p(P_i, \epsilon)$. Para estos puntos debe verificarse que $d_{ik} = d(P_i, P_k) < \epsilon$, y utilizando (14):

$$d_{ik}^2 = (d_i - d_k)^2 + 2 \cdot d_i \cdot d_k \cdot (1 - \cos(\theta_{ik})) = (h-1)^2 d_i^2 + 2h d_i^2 (1 - \cos(\theta_{ik})) < \epsilon^2,$$

lo cual implica que

$$(23) \quad (h-1)^2 + 2h(1 - \cos\theta_{ik}) < \frac{\epsilon^2}{d_i^2} < \frac{\epsilon^2}{M^2},$$

donde $\frac{\epsilon^2}{M^2}$ debe ser una cantidad próxima a 0 si ϵ es suficientemente pequeño en relación a M .

Por tanto, la desigualdad (23) nos indica que los puntos próximos a P_i son aquellos para los que los valores de h y del $\cos\theta_{ik}$ están en un entorno de 1. Pero estos valores son transformados según la función (21), que es continua, en valores de $\cos(\alpha_{ik})$ próximos a 1, ya que se verifica que

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 1 \\ \cos\theta_{ik} \rightarrow 1}} \frac{\lambda^2 + hd_i^2 \cos\theta_{ik}}{\sqrt{d_i^2 + \lambda^2} \sqrt{h^2 d_i^2 + \lambda^2}} = \frac{\lambda^2 + d_i^2}{d_i^2 + \lambda^2} = 1.$$

Esta última expresión indica que puntos inicialmente próximos entre sí van a tener un coseno próximo a 1 cuando son desplazados en \mathbb{R}^{p+1} .

3. Por otra parte, si seguimos considerando un punto P_i no contenido en un entorno del origen de \mathbb{R}^p , para cualquier valor de $\cos\theta_{ik}$ se verifica que

$$\lim_{h \rightarrow \infty} \frac{\lambda^2 + hd_i^2 \cos\theta_{ik}}{\sqrt{d_i^2 + \lambda^2} \sqrt{h^2 d_i^2 + \lambda^2}} = \frac{d_i \cos\theta_{ik}}{\sqrt{d_i^2 + \lambda^2}} < \cos\theta_{ik},$$

lo cual indica que, independientemente del ángulo inicial que formen los puntos P_i y P_k , a medida que los puntos se alejen más, el valor de $\cos\alpha_{ik}$ será menor que el de $\cos\theta_{ik}$.

4. Por último, el límite

$$\lim_{d_i \rightarrow 0} \frac{\lambda^2 + hd_i^2 \cos\theta_{ik}}{\sqrt{d_i^2 + \lambda^2} \sqrt{h^2 d_i^2 + \lambda^2}} = 1$$

indica que con los puntos que se encuentran en un entorno del origen de coordenadas, vamos a obtener al desplazarlos cosenos próximos a 1, independientemente del ángulo inicial que formen.

■

La Figura 5 es una representación de las curvas de superficie obtenidas con el Software Mathematica [23] para el $\cos\alpha_{ik}$, cuando se toma $\lambda = 1$ y $d_i = 1$ y se hace variar h en $[0,5]$ y θ_{ik} en $[-\pi, \pi]$. El sombreado de las superficies que encierran indican la evolución del valor del $\cos\alpha_{ik}$, desde 1 (color blanco) hasta 0 (color negro). Puede observarse cómo a medida que h se va haciendo más grande y θ_{ik} se aleja de 0° , las curvas se van oscureciendo.

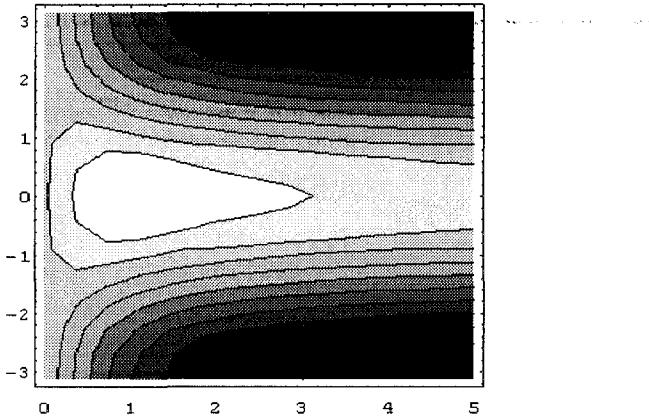


Figura 5. Representación mediante curvas de superficies de $\cos \alpha_{ik}$.

Por otra parte, también puede comprobarse que estas curvas de superficie se alargan mucho más hacia la derecha cuando se aumenta el valor de d_i en relación al de $\lambda = 1$. Esto nos indica que cuando las distancias d_i son todas más grandes, las diferencias de distancias entre puntos próximos serán también más grandes y los valores del $\cos \alpha_{ik}$ seguirán siendo próximos a 1 incluso para valores de h mayores.

Estos resultados nos permiten utilizar los elementos de WW' en el modelo Q-factorial como medidas de similaridad que van a conservar la configuración inicial de los puntos. Las características del modelo factorial obtenido permiten establecer una regla clara de clasificación entre los elementos, obteniendo al mismo tiempo el número de posibles clusters y la asignación de los elementos a ellos.

El modelo (17), para la matriz W , obtiene un conjunto de q factores, cuyo número puede venir determinado por la proximidad a 1 del coeficiente (3). Cada uno de estos factores tiene posibilidad de determinar dos clusters, uno en su dirección positiva y otro en la negativa. Denotemos estas direcciones por $g_1^+, g_2^+, \dots, g_q^+$, $g_1^-, g_2^-, \dots, g_q^-$.

Una vez obtenidos los factores, la matriz de estructuras $S = (s_{ij})$ que se obtiene después de realizar una rotación oblicua, será la que determine el número de clusters y asigne cada elemento a su grupo correspondiente. En concreto, para cada elemento, la estructura máxima en valor absoluto determinará la asignación a la dirección correspondiente, es decir:

$$I_i \in \begin{cases} g_j^+ & \text{si } \max_{p=1, \dots, q} |s_{ip}| = s_{ij} \\ g_j^- & \text{si } \max_{p=1, \dots, q} |s_{ip}| = -s_{ij} \end{cases}$$

4.2. Obtención del desplazamiento de la nube de puntos

En las transformaciones efectuadas a la matriz $X_{n,p}$ hasta llegar a la $W_{n,p+1}$ se ha dejado un punto sin resolver: ¿qué distancia desplazaremos los puntos en la dimensión $p+1$?

Si recordamos que la traslación a través de esta dimensión la hemos realizado con el objetivo de ‘tener una perspectiva mejor’ desde el origen para detectar los posibles grupos homogéneos en los datos, parece lógico que a la hora de determinar cuánto debemos desplazarnos, es decir el valor de λ , lo hagamos de forma que tal valor haga máxima la dispersión que presentan los puntos desde el origen.

Pueden tomarse varias formas de medir la dispersión que presentan los datos. La variación total, obtenida con la traza de la matriz de varianzas-covarianzas de W podría ser un buen coeficiente si no fuera porque va a ser siempre n el número de filas de X , independientemente del valor de λ . En efecto,

$$\text{tr}(W'W) = \sum_{j=1}^{p+1} \sum_{i=1}^n w_{ij}^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{p+1} w_{ij}^2 = \sum_{i=1}^n 1 = n$$

En su lugar, Mardia et al. [18] recogen el concepto de varianza generalizada que Wilks [22], y anteriormente también Frisch [6], definieron y que utilizaremos para este propósito.

Definicion (Mardia et al., [18], p.13)

Dado un vector aleatorio con p variables observadas sobre n individuos y dada la matriz de varianzas-covarianzas muestrales $S_{pp} = (s_{jk})$, siendo

$$s_{jk} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)(x_{ik} - \bar{x}_k) \quad j, k = 1, \dots, p,$$

se define la varianza generalizada como el determinante de S

$$VG = \det(S) = |S|$$

La varianza generalizada es una medida que resume la dispersión general de las p variables en el conjunto de los n individuos. Puede ser utilizado para determinar el desplazamiento imponiendo que el valor λ lo haga máximo para la nube de puntos determinada por W . Se probará a continuación que este máximo existe para una función que es múltiplo de la varianza generalizada de W : $f(\lambda) = \det(W'W)$

Proposición 2:

Dada la matriz $X_{n,p}$ centrada por columnas; $T_{n,p+1}$ la obtenida al trasladar los datos por una dimensión más, cuya última columna tiene por elementos el parámetro λ , y la matriz normalizada por las filas $W_{n,p+1}$, la dispersión que presentan los datos en \mathbb{R}^{p+1} desde el origen, es directamente proporcional a $\det(W'W)$. Además, la función $f(\lambda) = \det(W'W)$ alcanza un máximo finito en $[0, \infty]$.

Demostración:

Con los datos centrados, considerados como puntos de \mathbb{R}^p , la varianza generalizada es el determinante de la matriz de covarianzas $S = (1/n)X'X$.

Cuando estos datos se incluyen en un espacio de dimensión $p + 1$ y se desplazan, el volúmen del hipercono determinado por $\det(W'W)$ es 0 cuando $\lambda = 0$.

Cuando λ tiende a ∞ , tal volumen dependerá de

$$f(\lambda) = \sum_{j_1 \dots j_{p+1}} (-1)^{j_1 + \dots + j_{p+1}} h_{1j_1} \dots h_{(p+1)j_{p+1}}$$

con $j_1 \dots j_{p+1}$ cualquier permutación del orden natural y siendo los términos h_{jk} los elementos de $H = W'W$ de la forma

$$\begin{aligned} h_{jk} &= \sum_{i=1}^n \frac{x_{ij}x_{ik}}{\|t_i\|^2} = \sum_{i=1}^n \frac{x_{ij}x_{ik}}{\sum_{j=1}^p x_{ij}^2 + \lambda^2} \quad j, k = 1, \dots, p \\ h_{j(p+1)} &= \sum_{i=1}^n \frac{c_{ij}\lambda}{\|t_i\|^2} = \sum_{i=1}^n \frac{x_{ij}\lambda}{\sum_{j=1}^p x_{ij}^2 + \lambda^2} \quad j = 1, \dots, p \\ h_{(p+1)(p+1)} &= \sum_{i=1}^n \frac{\lambda^2}{\|t_i\|^2} = \sum_{i=1}^n \frac{\lambda^2}{\sum_{j=1}^p x_{ij}^2 + \lambda^2} \end{aligned}$$

con t_i las filas de la matriz T . Estos términos tienden todos a 0 cuando λ tiende a ∞ , excepto el $h_{(p+1)(p+1)}$ que tiende a 1.

Tenemos, por tanto, que la función $f(\lambda) = \det(W'W)$ toma el valor $f(0) = 0$, y para un cierto valor k en adelante puede hacerse tan pequeña como se quiera.

Con esto, la función $f(\lambda)$, que es continua en el intervalo $[0, k]$ por ser sumas y productos de funciones continuas, está acotada, con lo que se sigue por continuidad que debe alcanzarse un máximo absoluto en tal intervalo, es decir que tendremos un valor de λ para el cual la nube de puntos desde el origen tendrá mayor dispersión.

■

4.3. Análisis del ejemplo de los datos Iris mediante el procedimiento propuesto

Los resultados obtenidos con las 10 primeras flores Iris, para la matriz T y W son

$$T = \begin{pmatrix} -9.1 & 2.7 & -25.1 & -11.9 & 6.7 \\ -13.1 & 3.7 & -25.1 & -10.9 & 6.7 \\ -13.1 & 5.7 & -29.1 & -11.9 & 6.7 \\ 5.9 & -2.3 & 6.9 & 1.1 & 6.7 \\ 2.9 & -8.3 & 5.9 & 1.1 & 6.7 \\ -0.1 & 1.7 & 8.9 & 4.1 & 6.7 \\ 4.9 & -2.3 & 16.9 & 8.1 & 6.7 \\ 7.9 & 0.7 & 16.9 & 10.1 & 6.7 \\ 3.9 & -2.3 & 11.9 & 1.1 & 6.7 \\ 9.9 & 0.7 & 11.9 & 9.1 & 6.7 \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} -0.30 & 0.09 & -0.83 & -0.39 & 0.22 \\ -0.42 & 0.12 & -0.80 & -0.35 & 0.21 \\ -0.37 & 0.16 & -0.82 & -0.34 & 0.19 \\ 0.51 & -0.20 & 0.59 & 0.09 & 0.58 \\ 0.23 & -0.66 & 0.47 & 0.08 & 0.53 \\ 0.00 & 0.14 & 0.74 & 0.34 & 0.55 \\ 0.24 & -0.11 & 0.82 & 0.39 & 0.32 \\ 0.35 & 0.03 & 0.76 & 0.45 & 0.30 \\ 0.27 & -0.16 & 0.82 & 0.07 & 0.46 \\ 0.51 & 0.03 & 0.62 & 0.47 & 0.35 \end{pmatrix}$$

El cálculo de la función a maximizar se realiza a través de la obtención de los autovalores de $W^T \cdot W$ y la maximización de su producto. Ambas tareas se realizan con subrutinas de FORTRAN de la librería IMSL.

La Tabla 5 contiene las distancias cuadradas originales de las 10 flores (triangular inferior) y los coeficientes de asociación dados en (21). En ella pueden apreciarse cómo estos coeficientes se aproximan a 1 tanto más cuanto que las distancias son menores.

Tabla 5. Matriz de distancias cuadradas originales (triangular inferior) y de similaridades (triangular superior) entre las 10 flores transformadas en W

Iris	I1	I2	I3	I4	I5	I6	I7	I8	I9	I10
I1	.991	.993	-.558	-.425	-.599	-.836	-.833	-.689	-.759	
I2	18		.997	-.615	-.465	-.570	-.836	-.841	-.709	-.791
I3	41	21		-.614	-.494	-.581	-.842	-.834	-.721	.773
I4	1443	1565	1890		.846	.769	.854	.842	.936	.874
I5	1395	1505	1846	46		.583	.717	.618	.810	.619
I6	1494	1554	1885	65	127		.909	.895	.875	.828
I7	2385	2485	2904	150	210	121		.980	.937	.930
I8	2541	2655	3066	194	308	165	22		.892	.976
I9	1732	1838	2203	29	73	50	75	131		.847
I10	2175	2307	2676	114	230	135	60	30	109	

Al obtener con W la solución dada por (17) con los tres primeros factores, se obtiene una matriz de estructuras dada en la Tabla 6, donde vemos cómo los Iris que tienen estructura más alta con el factor primero son del 6° al 10°, los que se asocian con el segundo factor son del 1° al 3°, y con el tercer factor el 4° y 5°. Puede establecerse así una clasificación originada por los factores, que como puede comprobarse agrupa

a los Iris del grupo Setosa en el segundo factor, a dos Iris del grupo Versicolor en el tercero y a los cuatro del grupo Virginica y uno del Versicolor en el primero.

Tabla 6. Matriz de estructuras después de rotar con tres factores en el modelo Q-factorial para los datos Iris transformados en \mathbf{W} , con la clasificación obtenida

Iris	Factor 1	Factor 2	Factor 3
I1	-0.62	0.95	0.37
I2	-0.59	0.94	0.41
I3	-0.60	0.94	0.44
I4	0.80	-0.54	-0.87
I5	0.51	-0.36	-0.94
I6	1.00	-0.59	-0.60
I7	0.91	-0.80	-0.69
I8	0.93	-0.82	-0.61
I9	0.85	-0.66	-0.81
I10	0.90	-0.77	0.62

Combinando la clasificación original de los datos originales con la obtenida se tiene la Tabla 7, la cual pone en evidencia que, a excepción del Iris 6°, hecho que era de esperar si se observan sus distancias respectivas en la Tabla 5, los demás han sido bien clasificados en un 90% de los casos.

Tabla 7. Correspondencia entre clasificación original y clasificación obtenida con el procedimiento propuesto para los datos Iris

Iris	Grupo	Clasif.
I1	A	g_2^+
I2	A	g_2^+
I3	A	g_2^+
I4	B	g_3^-
I5	B	g_3^-
I6	B	g_1^+
I7	C	g_1^+
I8	C	g_1^+
I9	C	g_1^+
I10	C	g_1^+

Cuando se ha utilizado el procedimiento con las 150 flores Iris (Fisher, 1936), los resultados obtenidos son algo peores que los anteriores, ya que se han conseguido clasificar bien a 124 de ellas (82.66 %), cuando se tomaron 2 factores, y a 111 (74 %)

cuando se tomaron 3 factores. Es evidente que el procedimiento de clasificación que se ha propuesto no sólo depende del número de factores que se tomen en el modelo Q-factorial, sino de todos aquellos parámetros que influyan al detectar separaciones entre los grupos: dimensión de los datos, número de grupos, número de elementos en cada grupo, etc.

5. ESTUDIO DE SIMULACIÓN DEL PROCEDIMIENTO Y COMPARACIÓN CON EL MÉTODO KM

Para evaluar el funcionamiento del procedimiento que se propone, se ha realizado una simulación generando una muestra de 100 conjuntos de datos, cada uno de ellos con 50 elementos entre los que existan grupos definidos.

Como el número de factores a tener en cuenta para la formación de esta muestra es muy elevado, se han acotado las posibilidades sin quitar generalidad y aleatoriedad a la muestra elegida. Para ello, utilizando la generación de números aleatorios entre 0 y 1 se ha obtenido para cada uno de los 100 conjuntos:

1. Un número aleatorio entre 1 y 5 que determine la dimensión del espacio inicial de los datos.
2. Un número aleatorio entre 2 y 6 que determine el número de grupos definido en cada conjunto.
3. Para cada grupo, un punto aleatorio del espacio determinado que será considerado como centro del grupo, exigiendo que la distancia mínima entre dos centros cualesquiera dentro de un conjunto sea al menos de 3 unidades.
4. Por último, en cada grupo se elige un número de elementos, con la restricción de que el conjunto en total tenga 50, y se han obtenido las coordenadas de los elementos sumando o restando a las coordenadas del centro un número aleatorio entre 1 y 3, calculado mediante un coeficiente de dispersión que se determina para cada grupo y coordenada.

Cuando se ha utilizado el procedimiento descrito en la sección 4 con los 100 conjuntos de elementos generados, hemos realizado los cálculos para distintas cotas impuestas a los autovalores de $\hat{W}'\hat{W}$ que, como se sabe, limitará en mayor o menor medida el número de factores a extraer en el modelo Q-factorial. Así, la Tabla 8 nos proporciona el porcentaje de elementos bien clasificados obtenido según el tanto por ciento de variabilidad mínimo que se ha exigido a cada factor para ser elegido en el modelo Q-factorial.

Tabla 8. Porcentaje de elementos bien clasificados de la muestra generada, según el porcentaje mínimo de variabilidad exigido a cada factor elegido en el modelo

% EXIGIDO	1	5	10	15	20	25	30
% BIEN CLASIF.	83.42	85.24	85.86	85.12	84.36	82.88	82.88

Como puede verse, el porcentaje mayor de elementos bien clasificados se obtiene cuando se toman los factores de forma que sean capaces de explicar al menos el 10% de la variabilidad total. Este resultado es el esperado ya que, por un lado, si se toma un valor más bajo el número de factores elegidos aumenta y ello hace que, al rotarlos, aparezcan más direcciones y, por tanto, más clusters. Por otro, si se toma un valor más alto, pueden despreciarse direcciones antes de la rotación que sean significativas a la hora de formar grupos.

Por otra parte, como hemos dicho anteriormente, este procedimiento puede también utilizarse para determinar el número de grupos en un conjunto. Si analizamos las direcciones (positivas o negativas) que han intervenido en cada uno de los 100 conjuntos para determinar las clasificaciones, podemos enfrentar en la Tabla 9 los parámetros número de grupos inicial con el número de direcciones significativas:

Tabla 9. Número de grupos inicial frente a número de direcciones significativas obtenidas en los 100 conjuntos generados

Nº dir.	Nº de grupos inicial				
	2	3	4	5	6
2	21	25	4	5	
3		15	12	2	2
4			5	4	
5				1	

Como puede verse, el procedimiento determina, en general, menos grupos de los que hay originalmente. La diagonal principal de la matriz formada con las 4 primeras columnas tiene por traza el número de conjuntos en los que el número de grupos inicial y el de direcciones obtenidas coinciden. En el 46% de los casos se ha obtenido el mismo número. Por otra parte, los elementos de la diagonal secundaria por encima de la principal representan aquellos conjuntos en los que el número de direcciones obtenidas ha sido una menos que el número de grupos inicial, obteniendo el 41% de estos casos. Resumiendo, en el 87% de los casos se ha obtenido el mismo número de grupos iniciales o uno menos.

Por otra parte, se ha confeccionado un algoritmo para obtener soluciones que clasifiquen a cada uno de los 100 conjuntos generados, utilizando el procedimiento no jerárquico de minimizar la traza de la matriz de dispersión dentro de un número de grupos dado (Everitt, [4]). Este criterio es equivalente al de colocar cada individuo en el cluster cuyo centro esté más próximo a él (algoritmo de K-medias), cuya partición resultante depende del número de clusters del que partamos y, en ocasiones (Blashfield, [1]), de la partición inicial de la que se parta.

Los resultados obtenidos con este algoritmo, teniendo en cuenta que se ha iniciado con la partición correcta en cada conjunto, muestran que no ha sido capaz de clasificar bien al 100 % de los elementos como debería esperarse, sino que ha logrado 4285 elementos bien clasificados del total de los 5000, es decir, un 87.7 %. Además, hemos comprobado que el algoritmo ha cambiado la agrupación original, al menos en un elemento, en 64 de los 100 conjuntos, lo cual nos da una idea de lo poco eficiente que resulta este algoritmo.

Si comparamos estos resultados con los obtenidos con el procedimiento propuesto, vemos que el de minimizar la traza se comporta de forma parecida cuando en el primero se toman los autovalores capaces de explicar al menos el 10 % de la dispersión de los datos, donde se obtenían el 85.86 % de datos bien clasificados. Pero además, hay que tener en cuenta que el primero tiene, por un lado, la ventaja sobre el segundo de que no necesita el conocimiento previo del número de grupos para obtener este porcentaje de clasificaciones y, por otro lado, que los resultados obtenidos no dependen de ninguna partición u ordenación inicial de los elementos.

6. CONCLUSIONES

Se ha propuesto un procedimiento de clasificación en el que, utilizando algunas transformaciones geométricas y el modelo Q-factorial, se ha conseguido dejar la decisión del número de clusters y la asignación de elementos al propio procedimiento. Los resultados, sin ser excelentes, no son peores que los de uno de los métodos más utilizados dentro del análisis cluster, con la ventaja de que no tenemos que partir de ningún conocimiento sobre el número de clusters.

No obstante, es evidente que el procedimiento depende del criterio de elección de los factores en el modelo Q-factorial. Los estudios de simulación parecen aconsejar que sean elegidos aquéllos que expliquen al menos entre un 5% y un 15% de la variabilidad total.

Además, el número de clusters que puede determinar está limitado por el doble de las direcciones factoriales (positivas y negativas) obtenidas, que dependen a su vez del número de variables. Esto desaconseja que el procedimiento pueda utilizarse en

conjuntos de datos donde el número de variables utilizadas sea pequeño en relación con el de posibles clusters o se sospeche la existencia de un número de clusters muy superior al de variables. De todas formas, futuros estudios pueden perfilar mejor todas estas características.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Profesor C.M. Cuadras las numerosas sugerencias realizadas a lo largo de su elaboración definitiva.

Así mismo, este trabajo ha sido parcialmente financiado por el proyecto de investigación PS96-1436 de la DGICYT, Ministerio de Educación y Cultura.

REFERENCIAS

- [1] **Blashfield, R.K.** (1976). «Mixture model tests of cluster analysis. Accuracy of four agglomerative hierarchical methods». *Psychol. Bulletin*, **83**, 377-385.
- [2] **Cuadras, C.M.** (1991). *Métodos de Análisis Multivariante*. 2^a ed. PPU, Barcelona.
- [3] **Eckart, C.** and **Young, G.** (1936). «Approximation of one matrix by another of lower rank». *Psychometrika*, **1**, 211-218.
- [4] **Everitt, B.** (1993). *Cluster Analysis*, 3^a ed., Edward Arnold.
- [5] **Fisher, R.A.** (1936). «The use of multiple measurements in taxonomic problems». *Ann. Eugen.*, **7**, 179-188.
- [6] **Frisch, R.** (1929). «Correlation an scatter in statistical variables». *Nordic Statistical Journal*, **8**, 36-102.
- [7] **Gabriel, K.R.** (1971). «The biplot-graphic display of matrices with applications to principal component analysis». *Biometrika*, **58**, 453-467.
- [8] **Gabriel, K.R.** (1981). «Biplot display of multivariate matrices for inspection of data and diagnosis». In *Interpreting Multivariate Data* (ed. V. Barnett), 147-173. Wiley, Chichester.
- [9] **Gnanadesikan, R.** (1977). *Methods for Statistical Data Analysis of Multivariate Observations*. Wiley, New York.
- [10] **Gordon, A.D.** (1981). *Classification*. Chapman and Hall, London.

- [11] **Greenacre, M.J.** (1984). *Theory and Applications of Correspondence Analysis*. Academic Press, London.
- [12] **Harman, H.H.** (1976). *Modern Factor Analysis*. The University of Chicago Press.
- [13] **Householder, A.S.** and **Young, G.** (1938). «Matrix approximation and latent roots». *Am. Math. Monthly*, **45**, 165-71.
- [14] **Jackson, J.E.** (1990). *A User's Guide to Principal Components*. Wiley, New York.
- [15] **Jambu, M.** (1991). *Exploratory and Multivariate Data Analysis*. Academic Press.
- [16] **Jennrich, R.I.** and **Sampson, P.F.** (1966). «Rotation for simple loadings». *Psychometrika*, **31**, 313-323.
- [17] **Jolliffe, I.T.** (1986). *Principal Component Analysis*. Springer-Verlag New York Inc.
- [18] **Mardia, K.V., Kent, J.T.** and **Bibby, J.M.** (1979). *Multivariate Analysis*. Academic Press, London.
- [19] **Reyment, R.** and **Jöreskog, K.G.** (1993). *Applied Factor Analysis in the Natural Sciences*. 2^a ed. Cambridge U.P.
- [20] **Sylvester, J.J.** (1889). «On the reduction of a bilinear quantic of the n.th order to the form of a sum of n products by a double orthogonal substitution». *Messenger of Mathematics*, **19**, 42-46.
- [21] **Thurstone, L.L.** (1947). *Multiple factor Analysis*. The University of Chicago Press.
- [22] **Wilks, S.S.** (1932). «Certain generalizations in the analysis of variance». *Biometrika*, **24**, 471-494.
- [23] **Wolfram, S.** (1991). *Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer*. 2^a ed. Addison-Wesley.

ENGLISH SUMMARY

A PROCEDURE OF CLUSTERING USING THE SVD OF A MATRIX. COMPARISONS WITH THE BIPILOT AND WITH THE Q-FACTOR MODEL

JUAN L. GONZÁLEZ CABALLERO*

MARIANO J. VALDERRAMA BONNET**

In this paper we intend to use the SVD to propose a geometric procedure that allows us to obtain natural clusters within a data set. It's inspired by the geometric representations that the biplot and, especially, the Q-factor model allow us to make of any individual or object set. It transforms first the $\mathbf{X}_{n,p}$ data matrix in $\mathbf{W}_{n,p+1}$, so that on obtaining the Q-factor model of \mathbf{W} , natural sets with greater clarity appear. Besides centering the \mathbf{X} data in columns, they move through another dimension and they are normalized in rows (\mathbf{W} matrix). The distance of displacement in the $(p+1)$ dimension is looked for to maximize $\det(\mathbf{W}'\mathbf{W})$, in order to maximize the generalized variance. The results that the paper include show that this distance exists and is finite and that the elements of \mathbf{WW}' matrix, that represent the cosins between the new row vectors, are next to 1 for individuals of a same cluster and far from 1 for individuals of different clusters. The paper finishes with analyzing the Iris data (Fisher[5]) with the proposed procedure, and with seeing its behaviour with a random sample of data sets with clusters, and subsequently its efficacy compared with the nonhierarchical clustering procedure of minimizing the trace of the within-group dispersion matrix.

Keywords: Singular value decomposition; factor models; biplot representation; generalized variance; nonhierarchical clustering methods.

AMS Classification (1991): 62H25, 62H30.

* Juan L. González Caballero. Dpto. de Matemáticas. Facultad de Medicina. Universidad de Cádiz.

** Mariano J. Valderrama Bonnet. Dpto. de Estadística e I.O. Facultad de Farmacia. Universidad de Granada.

– Received May 1996.

– Accepted September 1997.

The Singular Value Decomposition (SVD) of a matrix $X_{n,p}$ is a result described for the first time by the English mathematician Sylvester (1889), which allows us to write X in (1), using the principal directions obtained in the \mathbb{R}^p and \mathbb{R}^n spaces, where the row and column vectors of the X matrix can be represented, respectively. Its statistic importance is owed to Eckart & Young (1936) and Householder & Young (1938), who showed its use in obtaining the best least-squares fit of the X matrix for one matrix of less rank.

The SVD, and the spectral decomposition of a square matrix that is a special case of the SVD, are the foundation of many reduction techniques and data representation, as principal components, principal coordinates, some factor models, the correspondence analysis or the technique of biplot representation.

In the last few years, numerous references can be found in the literature about Cluster Analysis (Gnanadesikan (1977), Gordon (1981), Everitt (1993)), in which the use of geometric procedures of data representation are suggested that, in most cases, refer to some of the previous techniques. Although none of them are specifically designed for to indicate the presence of clusters within data, they are used for this purpose together with other procedures for obtaining homogenous groups, not only to indicate its presence but also for preventing excessive claims for cluster structure produced by more complex techniques clustering.

In this paper we intend to use the SVD to propose a geometric procedure that allows us to obtain natural clusters within a data set. This procedure is inspired by the geometric representations that the biplot and, especially, the Q-factor model allow us to make of any individual or object set.

In section 2, we present, in outline, the biplot representation model with the main results (4) to (13), that allow us to use it to obtain representations in the plan of element set that, sometimes, let us discover homogeneous. With the first ten Iris flowers (Table 1), used by Fisher (1936) in discrimination problems (3 of type Setosa, 3 of type Versicolor and 4 of type Virginica), the biplot representations are obtained when the data for columns are centred (Figure 1). This representation show that some natural sets can be discovered because the 3 Setosa flowers are separated from the rest.

In section 3, the R and Q factor models are introduced by means of SVD. Through the structure matrix obtained after rotating the solution (17) with the oblique rotation criterion proposed by Jennrich and Sampson (14), the Q-factor model of centred by columns and normalized in rows matrix, allows us to obtain (Table 4) practically the same natural sets as with the biplot representation.

In section 4, we propose a procedure that transforms first the $X_{n,p}$ data matrix in $W_{n,p+1}$, so that on obtaining the Q-factor model of W , natural sets with greater cla-

rity appear. Besides centering the X data in columns, they move through another dimension (T matrix), and they are normalized in rows (W matrix). The distance of displacement in the $(p + 1)$ dimension is looked for to maximize $\det(W'W)$, in order to maximize the generalized variance. The results that includes the section show that this distance exists and is finite and that the elements of WW' matrix, that represent the cosins between the new row vectors, are next to 1 for individuals of a same cluster and far from 1 for individuals of different clusters. The section finish on analyzing the Iris data with the proposed procedure again, and we obtain a structure matrix (Table 6) for the Q-factor model of W which is capable of clasifyng well 90 % of the elements.

In section 5, in order to evaluate the proposed procedure, we have seen its behavior with a random sample of data sets with clusters, and subsequently its efficacy compared with the nonhierarchical clustering procedure of minimizing the trace of the within-group dispersion matrix. Here, we can see that the percentages of well classified elements with boths procedures are very similar.

¿CUÁNTOS CLUSTERS HAY EN UNA POBLACIÓN?

JUAN JOSÉ PRIETO MARTÍNEZ*

Sea una población cerrada formada por un número desconocido K y finito de clusters. El método bootstrap es utilizado para estimar el número de clusters que constituyen una población. Se propone un estimador para K , el cual es ajustado y corregido por su sesgo estimado mediante el método bootstrap de Efron (1979). La varianza del «estimador bootstrap» se calcula por el método jackknife agrupado. Mediante simulación, el estimador es comparado con el de Bickel y Yahav (1985).

How many clusters are there in a population?

Clasificación AMS: 162G05

Palabras clave: Número de clusters, Bootstrap, Jackknife agrupado.

* Juan José Prieto Martínez. Universidad Carlos III de Madrid. c/Madrid, 126. 28903 Getafe.

-Recibido en marzo de 1996.

-Aceptado en septiembre de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

Existe una gran cantidad de trabajos en la literatura estadística sobre los métodos de estimación del número de clusters en una población, pero la mayoría de ellos han sido desarrollados en torno a la idea de que las probabilidades de observación de los distintos clusters son iguales. Ver, por ejemplo, Lewontin y Prout (1956), Darroch (1958), Harris (1968), Jonhson y Kotz (1977), Marchand y Schrowck (1982), Darroch y Ratclif (1980), Holst (1981) y Esty (1985).

Existe un concepto que está muy ligado con el de número de clusters de una población, que es el cubrimiento muestral. Se define como la suma de las probabilidades de los clusters observados en una muestra. En el caso de clusters igualmente probables, el cubrimiento viene dado por el número de clusters observados en una muestra, D , dividido por el número de clusters que constituyen la población, K . Darroch y Ratclif (1980) utilizaron exactamente la idea del cubrimiento muestral para estimar K .

Ahora bien, considerar la hipótesis de que las probabilidades de los distintos clusters son iguales es, en principio, un caso muy particular y poco frecuente. Por ejemplo, no existe una misma cantidad de animales para cada especie en un ecosistema; no se repite con la misma frecuencia cada una de las diferentes palabras que constituyen un texto; no se acuña la misma cantidad de las distintas monedas utilizadas en un país durante un centenario, etc. La mayoría de los trabajos realizados para poblaciones heterogéneas (es decir, constituidas por clusters no equiprobables) adoptan un enfoque paramétrico. Por ejemplo, Fisher, Corbet y Williams (1943) asumen que para cada cluster, el número de observaciones en la muestra se distribuye según una distribución de Poisson, y el parámetro de dicha distribución se asume que sigue una distribución Gamma. Muchos otros artículos sobre modelos de abundancia de especies en un ecosistema también hacen consideraciones paramétricas. Ver, por ejemplo, McNeil (1973), Engen (1978), Efron y Thisted (1976). Fue Esty (1985), el primero en estimar el número de clusters en una población heterogénea mediante el concepto de cubrimiento muestral, aunque bajo un modelo paramétrico. Chao (1992) propone una técnica de estimación no paramétrica, pero utilizando también la idea del cubrimiento muestral. Bickel y Yahav (1985) propone un método no paramétrico para una población heterogénea sin utilizar el concepto de cubrimiento muestral.

La propuesta de este artículo es justamente plantear una técnica de estimación no paramétrica alternativa al estimador de Bickel (1985), sin necesidad de plantear un modelo de probabilidad ni de recurrir al concepto de cubrimiento muestral, demostrándose por métodos computacionales que el estimador propuesto es menos sesgado que el estimador de Bickel y Yahav (1985).

Por tanto, considérese una población cerrada en la cual las observaciones están agrupadas en K clusters. El significado de cerrada hace alusión a que durante el estudio

no se producen entradas o salidas de clusters existentes. Se propone inicialmente un estimador sesgado, el cual es corregido por su sesgo estimado mediante el método bootstrap de Efron (1979). En el apartado 2 se describe detalladamente dicho método, el cual es aplicado en el siguiente apartado para obtener el estimador ajustado. También se calcula su esperanza matemática y su varianza, esta última mediante el método jackknife agrupado. En el último apartado se refleja un estudio realizado por simulación para el estimador propuesto. Además de dar su valor, es comparado con el valor del estimador de Bickel y Yahav (1985), bajo distintas distribuciones de probabilidad. Se presentan seis casos posibles de una población que pasa de ser totalmente homogénea a ser heterogénea, comprobando la eficiencia del estimador propuesto frente a la del estimador de Bickel y Yahav. Finalmente se da el valor de su desviación típica aplicando el método jackknife generalizado.

2. MÉTODO BOOTSTRAP

Efron (1979) desarrolla el bootstrap como un método afín al jackknife, el cual requiere métodos de simulación para la estimación de un parámetro y de su varianza.

Considérese que x_1, x_2, \dots, x_n son observaciones independientes e idénticamente distribuidas de una función de distribución F desconocida. El procedimiento bootstrap sigue los siguientes pasos:

1. Construir la función de distribución de probabilidad empírica poniendo masa $1/n$ en cada una de las x_i , para $i = 1, \dots, n$.
2. Extraer una submuestra de tamaño n con reemplazamiento de la muestra inicial, denominándose muestra bootstrap.
3. Calcular el estimador de θ basado en la muestra bootstrap.
4. Repetir los pasos N veces hasta conseguir N estimadores de θ , denotándolos por $\hat{\theta}_{(i)}$, $i = 1, \dots, N$.
5. Calcular:

$$B_n(\theta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \hat{\theta}_{(i)}$$

y

$$\hat{V}(B_n(\theta)) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\hat{\theta}_{(i)} - B_n(\theta))^2.$$

Efron sugiere que N sea un valor del intervalo [50,200] para generar estimadores adecuados de θ .

3. ESTIMACIÓN NO PARAMÉTRICA DEL NÚMERO DE CLUSTERS

3.1. El estimador

Sea una población constituida por K clusters. Se extraen t muestras de tamaño n cada una con reemplazamiento de dicha población. La probabilidad de observar el cluster j en cualquiera de las t muestras es p_j , con $j = 1, \dots, K$. Se considerará como una sola muestra inicial la unión de las $(n \cdot t)$ observaciones procedentes de las t muestras. El único fin que tiene extraer t muestras es para saber con qué probabilidad estimada un cluster es observado. Nótese que:

$$\hat{p}_j = \frac{\text{número de muestras en que el cluster } j \text{ es observado}}{\text{número total de muestras}}$$

Sea K_1 el número de clusters diferentes observados en las t muestras. Naturalmente K_1 es un estimador sesgado. El objetivo principal es corregir y ajustar K_1 mediante su sesgo estimado. Para ello se extrae una submuestra de tamaño $(n \cdot t)$ con reemplazamiento de la muestra inicial (se denomina muestra bootstrap). Considerando la variable aleatoria indicatriz:

$$I_j = \begin{cases} 1 & \text{si el cluster } j \text{ es observado en la submuestra.} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

se define

$$K_2 = \sum_{j=1}^{K_1} I_j.$$

como el número de clusters observados en la muestra bootstrap.

Bajo el muestreo bootstrap, el valor esperado de K_2 viene dado por:

$$E_B(K_2) = E \left(\sum_{j=1}^{K_1} I_j \right) = \sum_{j=1}^{K_1} E_B(I_j).$$

Ahora, como las t muestras se realizan con reemplazamiento,

$$E_B(I_j) = \text{Prob}_B(I_j = 1) = 1 - \text{Prob}_B(I_j = 0) = 1 - (1 - (n_j/t))^{nt},$$

donde n_j es el número de muestras en que el cluster j es observado. Obsérvese que esta expresión es un valor muestral y no la esperanza matemática de la variable aleatoria indicatriz, la cual participa en el cálculo del sesgo producido por K_2 . Por consiguiente, un estimador del sesgo producido viene dado por:

$$S_e(K_2) = \sum_{j=1}^{K_1} (1 - (n_j/t))^{nt},$$

y el estimador bootstrap para K es:

$$(1) \quad \hat{K} = K_1 + \sum_{j=1}^{K_1} (1 - (n_j/t))^{nt}$$

Nótese que el valor más pequeño de \hat{K} es K_1 si y sólo si cada cluster de los K_1 es observado en las t muestras ($n_j = t$). En cambio, si $n_j = 1$ (para $j = 1, \dots, K_1$), entonces el valor máximo de \hat{K} es $K_1 + K_1 (1(1/t))^{nt} = K_1 (1(t1/t))^{nt}$.

3.2. La esperanza matemática de \hat{K}

Tomando esperanzas en (1),

$$E(\hat{K}) = E \left(K_1 + \sum_{j=1}^{K_1} (1 - (n_j/t))^{nt} \right).$$

Ahora,

$$\begin{aligned} E \left(\sum_{j=1}^{K_1} (1 - (n_j/t))^{nt} \right) &= E \left(\sum_{j=1}^{K_1} I_j (1 - (n_j/t))^{nt} \right) = \\ &= \sum_{j=1}^K \sum_{r=1}^t (1 - (r/t))^{nt} \binom{t}{r} p_j^r (1 - p_j)^{t-r}. \end{aligned}$$

Por otro lado, si

$$\phi_j = \begin{cases} 1 & \text{si el cluster } j \text{ es observado en alguna de las } t \text{ muestras iniciales.} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

$$\begin{aligned} (2) \quad E(K_1) &= E \left(\sum_{j=1}^K \phi_j \right) = \sum_{j=1}^K p(\phi_j = 1) = \sum_{j=1}^K (1 - p(\phi_j = 0)) = \\ &= \sum_{j=1}^K (1 - (1 - p_j)^{nt}) = K - \sum_{j=1}^K (1 - p_j)^{nt}. \end{aligned}$$

Así,

$$\begin{aligned} (3) \quad E(\hat{K}) &= K - \sum_{j=1}^K (1 - p_j)^{nt} + \sum_{j=1}^K \sum_{r=1}^t (1 - (r/t))^{nt} \binom{t}{r} p_j^r (1 - p_j)^{t-r} = \\ &= K - \sum_{j=1}^K \left\{ (1 - p_j)^{nt} - \sum_{r=1}^t \binom{t}{r} (1 - (r/t))^{nt} p_j^r (1 - p_j)^{t-r} \right\}. \end{aligned}$$

3.3. La varianza de \hat{K}

Cada muestra de tamaño n se divide en g grupos de tamaño h de manera que se van eliminando observaciones en bloques de cada muestra; es decir, primero se eliminan $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_h^{(1)}$ de la primera muestra, $x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \dots, x_h^{(2)}$ de la segunda muestra, etc; luego se eliminan $x_{h+1}^{(1)}, \dots, x_{2h}^{(1)}$ de la primera muestra, $x_{h+1}^{(2)}, \dots, x_{2h}^{(2)}$ de la segunda muestra, etc; en definitiva, se elimina de cada muestra uno cualquiera de los grupos y se recalcula el estimador propuesto denotado por $\hat{K}_{(i)}$. Definiendo

$$\hat{K}_{(\cdot)} = \frac{1}{g} \sum_i K_{(i)},$$

la varianza de \hat{K} viene dada por

$$\text{Var}(\hat{K}) = \frac{g-1}{g} \sum_i (K_{(i)} - \hat{K}_{(\cdot)})^2.$$

Este procedimiento de cálculo de la varianza se denomina método jackknife agrupado. Ver Efron (1982).

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Considérese una muestra aleatoria de tamaño n . Definiendo

$$I_j = \begin{cases} 1 & \text{si } X_j > 0 \\ 0 & \text{si } X_j = 0 \end{cases},$$

donde X_j es el número de veces que el cluster j es observado, se tiene que:

$$D = \sum_{j=1}^K I_j$$

es el número de clusters observados; y

$$f_i = \sum_{j=1}^K I(X_j = i), \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

es el número de clusters que son observados exactamente i veces en la muestra n .

Entonces, una cota inferior para K obtenida por Bickel y Yahav (1985) es

$$\hat{K}_{BY} = D + (f_1/n) \left(\left(\frac{\sum_{j=1}^K X_j}{f_1} \right)^{\frac{1}{n-1}} - 1 \right)^{-1}.$$

Entonces, para comprobar la eficacia del estimador propuesto \hat{K} con respecto al estimador \hat{K}_{BY} , se han evaluado mediante métodos computacionales por simulación. La evaluación de \hat{K} ha sido llevada a cabo simulando t muestras aleatorias (en particular 1 y 5 muestras) de tamaño 50 y 100 de una población de 200 clusters. Las probabilidades de observar los diferentes clusters han sido consideradas pertenecientes al intervalo $[0,0020; 0,01]$. Se han considerado 6 casos posibles. En el primer caso se han considerado las probabilidades iguales. En el segundo los primeros 100 clusters tienen probabilidades 0,004 de ser observados y los 100 siguientes 0,006. Los siguientes casos se van considerando poblaciones más heterogéneas. Cada caso se ha simulado 50 veces y se han tomado el promedio de los resultados. Se han restringido los tamaños de la muestras a 50 y 100 por motivos que se comentan a continuación. Para saber si el método para el cálculo de la varianza del estimador propuesto es apropiado para conocer su error estándar, también se han realizado métodos computacionales tales que los grupos en que se ha dividido las muestras de tamaño 50 y 100 son de 5 y 10 elementos respectivamente.

Los resultados obtenidos indican que:

- Para poblaciones con probabilidades de observación iguales, la estima de \hat{K} es preferible a la de \hat{K}_{BY} .
- En poblaciones heterogéneas es preferible utilizar \hat{K} que \hat{K}_{BY} , donde éste siempre infraestima K , y en cambio \hat{K} , con $t = 1$, no siempre da un valor por defecto o por exceso. Sin embargo, cuando t y/o n crece el sesgo es por defecto. Su justificación viene a continuación.
- Para cualquier población, el sesgo estimado por \hat{K} cuando se toma pocas muestras es siempre menor que cuando se toman muchas muestras. Además, fijado t , es preferible no considerar un tamaño muestral excesivamente grande. Esto es debido a que el segundo sumando de \hat{K} está formado por sumas de valores comprendidos en el intervalo $(0,1)$ con exponente $(n \times t)$. Ver (1).
- Para cualquier población, el sesgo cometido por \hat{K}_{BY} cuando $n = 50$ es siempre mayor que cuando $n = 100$.
- El sesgo de cada estimador aumenta cuando la población es más heterogénea, aunque para \hat{K} (con $t = 1$) lo hace más débilmente. Por otro lado, obsérvese que es preferible utilizar \hat{K} (cuando t crece) que \hat{K}_{BY} .

- La varianza de \hat{K} cuando $n = 50$ es más pequeña que cuando $n = 100$. A medida que la población es más heterogénea, la varianza es ligeramente mayor.

Tabla 1

Casos	n	p_j	\hat{K}_{BY}	Nº de muestras	Estimador Bootstrap	$V(\hat{K})$
1	50	$p_j = 0.005$	130.15	1	211.05	29.36
		$j = 1 - 200$		5	152.60	
	100		156.69	1	219.98	34.36
				5	172.74	
2	50	$p_j = 0.004$	128.67	1	195.26	28.12
		$j = 1 - 100$		5	145.97	
		$p_j = 0.006$	154.35	1	210.09	31.35
		$j = 101 - 200$		5	142.35	
	100		126.90	1	197.56	25.56
				5	149.23	
3	50	$p_j = 0.0035$	143.04	1	203.81	30.54
		$j = 1 - 90$		5	141.79	
		$p_j = 0.0045$		1	212.32	29.63
		$j = 91 - 180$		5	166.32	
		$p_j = 0.014$		1	224.36	33.71
	100	$j = 181 - 200$		5	155.97	
			131.15	1		
				5		
		$p_j = 0.01$	149.33	1		
		$j = 1 - 10$		5		
4	50	$p_j = 0.004$	149.33	1		
		$j = 11 - 100$		5		
		$p_j = 0.003$		1		
		$j = 101 - 190$		5		
	100	$p_j = 0.023$	149.33	1		
		$j = 191 - 200$		5		

Tabla 1 (cont.)

Casos	n	p_j	\hat{K}_{BY}	Nº de muestras	Estimador Bootstrap	$V(\hat{K})$
5	50	$p_j = 0.0035$	128.47	1	209.36	32.23
		$j = 1 - 50$		5	155.86	
		$p_j = 0.006$				
		$j = 51 - 100$				
		$p_j = 0.002$				
	100	$j = 101 - 125$				
		$p_j = 0.009$	144.73	1	189.49	39.36
		$j = 126 - 150$		5	148.21	
		$p_j = 0.005$				
		$j = 151 - 200$				
6	50	$p_j = 0.006$	149.52	1	216.52	36.23
		$j = 1 - 25$		5	174.25	
		$p_j = 0.0025$				
		$j = 26 - 50$				
		$p_j = 0.009$				
		$j = 51 - 75$				
		$p_j = 0.008$		1	222.89	
	100	$j = 76 - 100$	162.19	5	172.12	42.97
		$p_j = 0.001$				
		$j = 101 - 125$				
		$p_j = 0.002$				
		$j = 126 - 150$				
		$p_j = 0.005$				
		$j = 151 - 175$				
		$p_j = 0.004$				
		$j = 176 - 200$				

REFERENCIAS

- [1] **Bickel, P.J. y Yahav, J.A.** (1985). «On estimating the number of unseen species: How many executions were there?» *Technical Report*, **43**, Department of Statistics, University of California, Berkeley.
- [2] **Chao, A.** (1992). «Estimating the number of classes via sample coverage». *Journal of the American Statistical Association*, **87**, 417, 211-217.
- [3] **Darroch, J.N.** (1958). «The multiple recapture census I: Estimation of a closed population». *Biometrika*, **40**, 343-359.
- [4] **Darroch, J.N. y Ratcliff, D.** (1980). «A note on capturerecapture estimation». *Biometrika*, **45**, 343-359.
- [5] **Efron, B.** (1979). «Bootstrap methods: Another look at the jackknife». *The Annals of Statistics*, **7**, 1-26.
- [6] **Efron, B.** (1982). *The jackknife, the bootstrap and the others resampling plans*. SIAM. Philadelphia.
- [7] **Efron, B. y Thisted, R.** (1976). «Estimating the number of unseen species: How many words did Shakespeare Know?» *Biometrics*, **63**, 435-447.
- [8] **Engen, S.** (1978). *Stochastic Abundance Models*. London: Chapman-Hall.
- [9] **Esty, W.W.** (1985). «Estimation of the number of classes in a population and the coverage of a sample». *Mathematical Scientist*, **10**, 41-50.
- [10] **Esty, W.W.** (1986). «The size of a coinage». *Numismatic Chronicle*, **146**, 185-215.
- [11] **Good, I.J.** (1953). «On the population frequencies of species and the estimation of population parameters». *Biometrika*, **40**, 237-264.
- [12] **Harris, B.** (1968). «Statistical inference in the classical occupancy problem unbiased estimation of the number of classes». *Journal of the American Statistical Association*, **63**, 837-847.
- [13] **Holst, L.** (1981). «Some asymptotic result for incomplete multinomial or poisson samples». *Scandinavian Journal of Statistic*, **8**, 243-246.
- [14] **Johnson, N.L. y Kotz, S.** (1977). *Urn models and their applications: An approach to modern discrete probability theory*. New York: John Wiley.
- [15] **Lewontin, R.C. y Prout, T.** (1956). «Estimation of the number of different classes in a population». *Biometrics*, **12**, 211-223.

- [16] **McNeil, D.** (1973). «Estimating an Author's vocabulary». *Journal of the American Statistical Association*, **68**, 341, 92-97.
- [17] **Marchand, J.P. y Schroeck, P.E.** (1982). «On the estimation of the number of equally likely classes in a population». *Communications in Statistics, Part ATheory and Methods*, **11**, 1139-1146.

ENGLISH SUMMARY

HOW MANY CLUSTERS ARE THERE IN A POPULATION?

JUAN JOSÉ PRIETO MARTÍNEZ*

Let a closed population with a unknow finite number K of clusters. The bootstrap method is used to estimate the number of cluster in a population. An estimate for K is proposed, adjusted and bias corrected by mean the bootstrap. Grouped jackknife is used to calculate its variance. The performance of the proposed estimator is investigated by means of Monte Carlo simulations and it is compared with Bickel and Yahav (1985).

AMS Classification: 162G05

Keywords: Number of clusters, Bootstrap, Grouped Jackknife.

* Juan José Prieto Martínez. Universidad Carlos III de Madrid. c/Madrid, 126. 28903 Getafe.

-Received March 1996.

-Accepted September 1997.

Assume that there is unknown number K of different clusters in a population. Suppose t samples of size n are taken with replacement. Denote p_j the probability that any observation belong to the j th cluster, $j = 1, \dots, K$, $\sum_{j=1}^K p_j = 1$. If $(n \times t)$ observations is only one sample, then an estimator of p_j is:

$$\hat{p}_j = \frac{\text{number of samples where the cluster } j \text{ is observed}}{\text{number of samples}}$$

Let be K_1 the number of distinct clusters observed in the t samples. K_1 is a biased estimator. Now the goal is correct and adjust K_1 for its estimated bias.

Then a subsample of size $(n \times t)$ with replacement is taken of the t samples. This is name «the bootstrap sample». If

$$I_j = \begin{cases} 1 & \text{if the cluster } j \text{ is observed in the bootstrap sample.} \\ 0 & \text{if the cluster } j \text{ is absent.} \end{cases}$$

$$K_2 = \sum_{j=1}^{K_1} I_j \text{ is the number of clusters observed in the bootstrap sample.}$$

Under bootstrap sampling the expected value of K_2 is given by:

$$E_B(K_2) = \sum_{j=1}^{K_1} [1 - (1 - (n_j/t))^{nt}] ,$$

with n_j the number of samples where the cluster j is observed.

The estimator of the bias is then:

$$S_e(K_2) = \sum_{j=1}^{K_1} (1 - (n_j/t))^{nt}$$

and a (bootstrap) estimator of K is:

$$\hat{K} = K_1 + \sum_{j=1}^{K_1} (1 - (n_j/t))^{nt} .$$

The expectation of \hat{K} is:

$$E(\hat{K}) = K - \sum_{j=1}^K \left\{ (1 - p_j)^{nt} - \sum_{r=1}^K \binom{t}{r} (1 - (r/t))^{nt} p_j^r (1 - p_j)^{t-r} \right\} ,$$

and its variance is calculate using the grouped jackknife.

The performance of the proposed estimator is investigated by means of Monte Carlo simulations and it is compared with Bickel and Yahav (1985) (\hat{K}_{BY}). The simulations results indicate that \hat{K} is better than \hat{K}_{BY} .

UNA NOTA SOBRE EL CONTRASTE DE RELACIONES DE COINTEGRACIÓN ENTRE ÍNDICES DE PRECIOS*

ANDREU SANSÓ ROSELLÓ**

MANUEL ARTÍS ORTUÑO**

JORDI SURIÑACH CARALT**

El contraste de relaciones de equilibrio usando técnicas de cointegración, entre variables económicas en general y entre índices de precios en particular, ha recibido elevada atención en los últimos años. De entre estas últimas relaciones destacar el contraste de la hipótesis de la Paridad de Poder de Compra (PPP). Johnson (1991) desarrolla un contraste para tratar de explicar los rechazos que de dicha hipótesis se producían. El supuesto de qué parte es qué, aun cuando la hipótesis PPP se cumpla para los bienes individuales, cambios relativos de precios en los índices unido a diferentes ponderaciones, pueden provocar dichos rechazos. En artículo que se presenta se realiza una extensión y crítica del trabajo citado. Respecto a las extensiones, se amplía el análisis a índices de Laspeyres, a la desagregación del índice en subíndices de grupos de gasto y al análisis de convergencia en tasas de inflación. Respecto a las críticas, se muestran las diferentes interpretaciones del contraste propuesto, las limitaciones en cuanto a su aplicación y, en un intento de solucionar éstas, las pobres conclusiones que pueden extraerse de analizar los cambios relativos entre índices de grupo de gasto. De los desarrollos propuestos en la nota se desprende que el contraste de relaciones de equilibrio entre índices de precios ponderados presenta la dificultad de que un rechazo de dicha relación no puede interpretarse directamente como un rechazo de la hipótesis económica subyacente (PPP, convergencia en tasas de inflación, etc.).

Testing Cointegration Relationships between price indexes. A note.

Palabras clave: Índices de precios, Cointegración, PPP, Convergencia.

Clasificación AMS: 62P20, 62M10, 90A20

* Los autores desean agradecer los comentarios de un evaluador anónimo.

** Andreu Sansó Rosselló, Manuel Artís Ortúñoz i Jordi Suriñach Caralt. Departament d'Econometria, Estadística i Economia Espanyola. Universitat de Barcelona. Av. Diagonal, 690. 08034 Barcelona.
E-mail: sanso@riscd2.eco.ub.es.

- Recibido en diciembre de 1996.

- Aceptado en septiembre de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años han aparecido abundantes trabajos que tratan de contrastar diversas hipótesis económicas utilizando técnicas del análisis de cointegración. Algunas de estas hipótesis establecen relaciones de equilibrio entre índices de precios agregados o transformaciones de éstos. De entre éstas destacan la hipótesis de Paridad del Poder de Compra (*Purchasing Power Parity*, PPP) o la hipótesis de convergencia entre tasas de inflación de diferentes áreas geográficas en el marco de un sistema de integración monetaria.

Respecto a la primera, ha aparecido evidencia tanto a favor como en contra de la misma y ha sido analizada tanto bilateral como multilateralmente. A ese respecto cabe citar, entre otros, los trabajos de Corbae y Ouliaris (1988), Layton y Stark (1990) que no hallan evidencia en favor de la hipótesis, y los de Enders (1988) y (1989), McNown y Wallace (1989), Kim (1990), Heri y Theurillat (1990) que sí la obtienen en algunos casos. Por lo que respecta a la hipótesis de convergencia en tasas de inflación, ejemplos de su contrastación son los trabajos de Artis y Nachane (1990) y Caporale y Pittis (1993) que estudian la convergencia en tasas de inflación entre diversos países miembros del Sistema Monetario Europeo y el trabajo de Sansó y Suriñach (1995) referente a la convergencia en tasas de inflación entre las Comunidades Autónomas.

Johnson (1991), con el objeto de proporcionar una explicación a los rechazos de la hipótesis de la PPP usando índices de precios agregados y el análisis de cointegración, desarrolla un contraste para tratar de explicar dichos rechazos. La idea de la que parte es de que dicha hipótesis puede rechazarse si hay cambios internos en los precios relativos de los índices y los países utilizan diferentes ponderaciones en la construcción de los índices de precios, aunque la hipótesis de PPP se cumpla para cada bien individualmente. En este trabajo se extiende el análisis iniciado por Johnson y se muestra la limitada capacidad del mismo para extraer conclusiones sobre si son los cambios internos en los índices los responsables del rechazo de la hipótesis de cointegración (o equivalentemente la hipótesis de PPP o de convergencia en tasas de inflación).

El trabajo se estructura como sigue: se expone el modelo desarrollado por Johnson para criticar los procedimientos habituales de contraste de la PPP utilizando índices agregados de precios. Posteriormente, se muestra el contraste sugerido por el autor para determinar si los cambios internos de precios relativos son los responsables del rechazo de dicha hipótesis. Una interpretación y crítica del contraste se expone en el apartado 3. Los dos siguientes apartados tratan de solucionar las críticas al contraste esbozadas anteriormente. Finalmente, en el apartado 6 se extiende el modelo al estudio de la convergencia en tasas de inflación. Termina el trabajo con una recopilación de las conclusiones.

2. EL MODELO DE JOHNSON

Supóngase que hay n bienes diferentes ($i = 1, \dots, n$). Sea p_{it} el logaritmo natural del precio doméstico del bien i -ésimo en el momento t , p_{it}^* el logaritmo natural del precio extranjero del bien i -ésimo y e_t el logaritmo natural del tipo de cambio (unidades monetarias domésticas por unidad monetaria extranjera). Supóngase que p_{it} , p_{it}^* y e_t son integrados de primer orden ($I(1)$). Si la hipótesis PPP se cumple para el bien i , entonces $\alpha = (1, -1, -1)'$ cointegra $x_{it} = (p_{it}, p_{it}^*, e_t)'$, es decir, $d_{it} = \alpha' x_{it} = p_{it} - p_{it}^* - e_t$ es estacionario ($I(0)$). Debe considerarse que ello no implica que todos los d_{it} ($i = 1, \dots, n$) sigan los mismos procesos. Si la PPP se cumple para todos los bienes $d_t = \alpha' x_t = p_t - p_t^* - e_t$ debería ser estacionario, donde p_t y p_t^* son los vectores de los logaritmos de los precios domésticos y extranjeros respectivamente.

Veamos como esta hipótesis no tiene porqué cumplirse cuando se utilizan índices de precios agregados. Sean los índices de precios:

$$(1) \quad p_t = \sum_{i=1}^n \delta_i p_{it}; \quad p_t^* = \sum_{i=1}^n \phi_i p_{it}^*$$

con $\sum \delta_i = 1$ y $\sum \phi_i = 1$, es decir, una media ponderada de los logaritmos de los precios de los n bienes.

Por otro lado, el logaritmo del precio doméstico del bien i -ésimo ($i = 2, \dots, n$) en relación al bien 1-ésimo, que se toma como numerario, es $\rho_{it} = p_{it} - p_{1t}$, y $\rho_{1t} = 0$. Si no hay cambios permanentes en los precios relativos de los bienes, entonces ρ_{it} será estacionario. El objetivo del modelo que se mostrará es llegar a determinar si los cambios permanentes en los precios relativos (junto con las diferencias de ponderación), δ_i , son los responsables del rechazo de la hipótesis de PPP.

Si ρ_{it} no es estacionario para algún i ($i = 2, \dots, n$), es decir, hay cambios permanentes en los precios relativos domésticos, y $\delta_i \neq \phi_i$, entonces α no cointegra $x_t = (p_t, p_t^*, e_t)'$. Ello se comprueba a partir de escribir d_t como:

$$(2) \quad d_t = \sum_{i=2}^n (\delta_i - \phi_i) \rho_{it} + \sum_{i=1}^n \phi_i d_{it}$$

Si se cumple la PPP para cada bien, el segundo sumatorio de la derecha de (2) es estacionario.

Además, se comprueba que d_t depende de los cambios relativos en los precios domésticos y de las ponderaciones de los diferentes bienes en cada país (δ_i y ϕ_i). Así, si ρ_{it} está integrado para algún i ($i = 2, \dots, n$) y $\delta_i \neq \phi_i$, entonces d_t será no estacionario, por lo que se rechazaría la hipótesis de PPP. De esta forma, los contrastes de la hipótesis de PPP pueden tender a rechazarla a pesar de cumplirse para cada bien individualmente.

Más adelante, en el apartado 4, se discute la aplicabilidad de este modelo a índices de precios tipo Laspeyres, como son, por ejemplo, los IPC nacionales y los regionales. Por otro lado, Johnson también construye un contraste para comprobar si el efecto de los cambios relativos de precios son los responsables del rechazo de la hipótesis de PPP. Éste se expone a continuación.

3. CONTRASTE PARA COMPROBAR SI EL EFECTO DE LOS CAMBIOS RELATIVOS DE PRECIOS ES EL RESPONSABLE DEL RECHAZO DE LA HIPÓTESIS DE PPP

Supóngase que d_t es integrado de primer orden, por lo que se habrá rechazado la PPP, pero que esta hipótesis se cumple para los bienes individuales y, por tanto, el último sumatorio de la derecha de la expresión (2) es estacionario. Así, los cambios en los precios relativos, ρ_{it} , junto con las diferencias en las ponderaciones son los responsables de la no estacionariedad de d_t . El contraste que propone Johnson para comprobar si los cambios de precios relativos no son los responsables del rechazo de la PPP cuando se usan índices de precios agregados, consiste en contrastar la hipótesis de que d_t y los ρ_{it} integrados no están cointegrados. Las etapas y la explicación del contraste se muestran a continuación:

- 1) Una vez contrastada la integración de primer orden de d_t , se contrasta la de los ρ_{it} ($i = 2, \dots, n$). Esto puede realizarse a partir de cualquier contraste de raíces unitarias. Johnson utiliza el contraste de Phillips y Perron (1988). Comprobada la integración de orden 1 de los mismos, al mostrar estos cambios permanentes, existe la posibilidad que sean los responsables del rechazo de la PPP.
- 2) Comprobar que los ρ_{it} no estacionarios no están cointegrados entre ellos. De forma similar a la primera etapa, esto puede llevarse a cabo mediante cualquiera de los contrastes de cointegración propuestos. Johnson utiliza el contraste de la traza multivariante de Phillips y Ouliaris (1990). El contraste de esta hipótesis es necesario, ya que no es suficiente que los ρ_{it} sean integrados para que d_t lo sea. En otras palabras, se podría dar el caso de que los ρ_{it} estuvieran cointegrados entre ellos y que el primer sumatorio de la derecha de (2) fuera estacionario, pero que d_t no lo fuese al incumplirse la PPP para algún bien (segundo sumatorio de (2) no estacionario). Así, esta etapa elimina esta posibilidad.
- 3) Contrastar que d_t no está cointegrado con los ρ_{it} integrados. La aceptación de la hipótesis de no cointegración significa que los cambios de los precios relativos y las diferentes ponderaciones NO son los responsables de la no estacionariedad de d_t . Es decir, que la fuente de no estacionariedad de d_t proviene, además de la de los ρ_{it} , de d_t , incumpliéndose la PPP para algún bien. En otras palabras, los ρ_{it}

no bastan para explicar la no estacionariedad de d_t . Johnson utiliza en esta etapa el contraste de no cointegración sobre los residuos de la regresión estática:

$$d_t = \text{cts} + \sum_{i=2}^n \theta_i \rho_{it} + u_t$$

Al esquema del contraste desarrollado por Johnson cabría añadir las matizaciones respecto a las diferentes implicaciones que tiene el rechazo de la hipótesis de no cointegración en la tercera etapa. Así, a pesar de que en la última etapa se rechace la hipótesis de no cointegración, la no estacionariedad de d_t puede ser debida tanto al efecto de los cambios relativos de precios y de las diferencias de ponderaciones como al incumplimiento del supuesto de estacionariedad de los d_{it} . Ello puede verse claramente si se considera que el vector cointegrante, $\theta = (\theta_2, \dots, \theta_n)'$ puede ser diferente al vector de diferencias de ponderaciones $(\delta_2 - \phi_2, \dots, \delta_n - \phi_n)$. Es decir, el no rechazo de una relación de cointegración entre d_t y ρ_{it} puede significar:

- a) Se cumple la hipótesis de PPP para todos los bienes, y la no estacionariedad de d_t se debe sólo al efecto de las ponderaciones y de los cambios relativos de precios. Este caso se da cuando $\theta_i = \delta_i - \phi_i$ ($i = 2, \dots, n$) al comprobarse que:

$$d_t - \sum_{i=2}^n (\delta_i - \phi_i) \rho_{it} = \sum_{i=1}^n \phi_i d_{it} \sim I(0)$$

de esta manera, la no estacionariedad individual de d_t viene explicada completamente por el efecto de los cambios relativos y de las diferencias de ponderación. Esta hipótesis es sencilla de contrastar cuando se conocen dichas diferencias de ponderación entre ambos índices.

- b) La fuente de no estacionariedad univariante de d_t puede ser debida, además de al efecto de los ρ_{it} , al incumplimiento de la PPP para algún bien (algún d_{it} no estacionario). Este caso se da cuando $\theta_i \neq \delta_i - \phi_i$ para algún i :

$$d_t - \sum_{i=2}^n \theta_i \rho_{it} \neq d_t - \sum_{i=2}^n (\delta_i - \phi_i) \rho_{it} = \sum_{i=1}^n \phi_i d_{it} \sim I(1)$$

A la vista de lo anteriormente señalado, en caso de rechazarse la hipótesis de no cointegración en la tercera etapa, debería comprobarse si el vector de diferencias de ponderaciones pertenece al espacio de cointegración con el fin de interpretar correctamente los resultados.

Al anterior contraste pueden dirigirse las siguientes críticas:

- 1) En general el número de bienes que comprenden los índices de precios agregados es muy elevado. Ello provoca que no se puedan realizar los contrastes de cointegración de las etapas 2 y 3 debido al agotamiento de los grados de libertad, o bien a la no disposición de valores críticos para los contrastes de cointegración, dado el elevado número de variables que aparecen en la regresión de cointegración y a que estos valores críticos dependen de cuantas variables se incluyen en el contraste. Johnson obvió este problema al usar los 9 grupos de gasto con que se divide el índice de precios agregado de Estados Unidos que él utiliza, en lugar de emplear directamente los precios de los bienes individuales. En este caso, la expresión (2) no es directamente utilizable, ya que para los índices de grupos sólo consideraría cambios relativos entre índices, sin tener en cuenta los cambios relativos entre precios. El desarrollo de una expresión similar a (2) cuando se consideran índices de precios de grupos de gasto se trata en el apartado 5.
- 2) La expresión (1) no es directamente aplicable a los índices de Laspeyres. Muchos de los índices de precios usados habitualmente, como por ejemplo el IPC español, suelen ser de Laspeyres. No obstante, la expresión (2) es aplicable a una transformación de los IPC. A ello se dedica el siguiente apartado.

4. DESARROLLO DEL MODELO PARA UN ÍNDICE DE LASPEYRES

La expresión general de un índice de Laspeyres es:

$$I_t = \frac{\sum_{i=1}^n q_{io} p_{it}}{\sum_{i=1}^n q_{io} p_{io}}$$

donde el primer subíndice hace referencia al bien y el segundo al momento temporal y q_{io} es la cantidad del bien i -ésimo consumida en el período base. De esta forma el logaritmo natural del índice $[\ln(\sum q_{io} p_{it}) - \ln(\sum q_{io} p_{io})]$ no coincide con la expresión (1). Por otro lado, podemos escribir:

$$\begin{aligned} \Delta_{12} \ln I_t &= \ln(\sum q_{io} p_{it}) - \ln(\sum q_{io} p_{it-12}) = \ln \frac{\sum q_{io} p_{it-12} (1 + \dot{p}_{it})}{\sum q_{io} p_{it-12}} = \\ &= \ln \left(1 + \sum \frac{q_{io} p_{it-12}}{\sum q_{io} p_{it-12}} \dot{p}_{it} \right) \end{aligned}$$

donde $p_{it} = p_{it-12} (1 + \dot{p}_{it})$ y \dot{p}_{it} es la tasa de crecimiento interanual del precio del bien i -ésimo.

Mediante la aproximación $\ln(1+x) \simeq x$ para valores pequeños de x , se obtiene:

$$(3) \quad \Delta_{12} \ln I_t \simeq \sum \frac{q_{io} p_{it-12}}{\sum q_{io} p_{it-12}} \dot{p}_{it} = \sum \delta_{it} \dot{p}_{it}$$

que cumple $\sum \delta_{it} = 1$, con $\delta_{it} = q_{io} p_{it-12} / (\sum q_{io} p_{it-12})$, aunque el sistema de ponderaciones es dinámico. De esta forma, el modelo desarrollado por Johnson podría ser aplicado a esta última expresión, aunque las conclusiones serán ligeramente distintas.

Por otro lado, esta formulación puede ser útil ya que existe evidencia de que los (logaritmos de los) IPC requieren tanto una diferenciación estacional, $(1 - L^{12})$, como una regular, $(1 - L)$, para conseguir su estacionariedad¹. Por tanto, $(1 - L^{12}) \ln \text{IPC}$ sería integrado de primer orden. De ese modo, esta transformación de los IPC cumple los dos supuestos en que se basa el modelo desarrollado por Johnson: la integración de primer orden de los índices y la suma unitaria de las ponderaciones. Asimismo, cabe señalar que con la expresión desarrollada no se contrastará la tendencia a la igualación de precios entre diferentes áreas geográficas, sino la tendencia a la igualación de las tasas interanuales de crecimiento.

5. DESARROLLO DEL MODELO CUANDO SE CONSIDERAN DIFERENTES ÍNDICES DE GRUPOS DE GASTO EN LUGAR DE PRECIOS INDIVIDUALES

En este apartado se generaliza el modelo de Johnson para considerar los cambios relativos entre índices de grupos de gasto en lugar de entre precios individuales. Supóngase que hay k grupos de gasto, cada uno con un índice de precios agregado, p_t^j ($j = 1, \dots, k$), de forma que:

$$p_t^j = \sum_{i=1}^{n_j} \delta_i^j p_{it}^j; \quad p_t^{j*} = \sum_{i=1}^{n_j} \phi_i^j p_{it}^{j*}$$

$$\sum_{j=1}^k n_j = n; \quad \sum_{i=1}^{n_j} \delta_i^j = \sum_{i=1}^{n_j} \phi_i^j = 1 \quad j = 1, \dots, k$$

donde p_{it}^j ($i = 1, \dots, n_j$) son los logaritmos de los precios domésticos de los bienes agrupados en la categoría de gasto j , y δ_i^j son sus respectivas ponderaciones dentro

¹Por ejemplo, a nivel español, Matea (1992) obtiene que algunas componentes del IPC son SI(2,1) (el de servicios y el de bienes no elaborados) por lo que el índice agregado también lo será; Vega (1991) también halla evidencia que el IPC, así como diferentes deflactores, son $I(2)$ por lo que la tasa de inflación sería $I(1)$. A nivel regional Sansó y Suriñach (1995) muestran la integración de primer orden de la tasa de inflación interanual de todas las Comunidades Autónomas.

del grupo j . Para el índice agregado se tendrá:

$$p_t = \sum_{j=1}^k \delta_j p_t^j; \quad p_t^* = \sum_{j=1}^k \phi_j p_t^{j*}$$

$$\sum_{j=1}^k \delta_j = \sum_{j=1}^k \phi_j = 1$$

Definiendo los cambios relativos entre grupos de gasto como $\rho_{jt} = p_t^j - p_t^1$ se puede derivar una expresión para d_t similar a (2):

$$\begin{aligned} d_t &= p_t - p_t^* - e_t \\ (4) \quad &= \sum_{j=1}^k \delta_j p_t^j - \sum_{j=1}^k \phi_j p_t^{j*} - e_t = \dots = \\ &= \sum_{j=2}^k (\delta_j - \phi_j) \rho_{jt} + \sum_{j=1}^k \phi_j d_{jt} \end{aligned}$$

donde $d_{jt} = p_t^j - p_t^{j*} - e_t$. Desarrollando ahora una expresión para d_{jt} similar a (2) se llega a:

$$\begin{aligned} d_{jt} &= \sum_{i=2}^{n_j} (\delta_i^j - \phi_i^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_i^j d_{it}^j \\ \rho_{it}^j &= p_{it}^j - p_{1t}^j; \quad d_{it}^j = p_{it}^j - p_{it}^{j*} - e_t \end{aligned}$$

por lo que (4) quedaría como:

$$(5) \quad d_t = \sum_{j=2}^k (\delta_j - \phi_j) \rho_{jt} + \sum_{j=1}^k \phi_j \left(\sum_{i=2}^{n_j} (\delta_i^j - \phi_i^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_i^j d_{it}^j \right)$$

De esta forma, aunque se cumpla la PPP para cada precio individual, es decir, que todos los d_{it}^j sean estacionarios, la no estacionariedad de d_t puede ser debida a dos tipos de factores:

- 1) Al efecto de los cambios relativos entre los índices de grupos de gasto combinado con las diferencias de ponderaciones entre índices de grupos de gasto. Es decir, al primer sumatorio de la derecha de (5);
- 2) Al efecto de los cambios relativos entre precios dentro de cada grupo de gasto, junto con las diferencias de ponderación entre índices de distintas áreas geográficas. Es decir, al segundo término de la derecha de la expresión (5).

De ese modo, la conclusión de Johnson de que, al no hallar cointegración entre d_t y los ρ_{it} , los cambios relativos de precios no parecen los responsables del rechazo de la hipótesis de PPP dos a dos entre Estados Unidos y Canadá, Francia, Italia, Japón, Reino Unido y República Federal Alemana, ha de ser matizada, ya que no ha considerado los cambios en los precios relativos dentro de cada grupo de gasto.

A la vista de los efectos antes comentados sobre la aplicación del contraste de Johnson cuando se usan índices de grupos de gasto, se pueden obtener sólo las siguientes conclusiones:

- a) En caso de no rechazo de la hipótesis de no cointegración en la tercera etapa del contraste, no se pueden obtener conclusiones por lo que respecta a si son los cambios en los precios relativos los causantes de la no estacionariedad de d_t . Lo que sí puede concluirse es que la no estacionariedad no sólo puede deberse al efecto de los cambios relativos entre índices de grupos de gasto y a las distintas ponderaciones de éstos;
- b) Si se rechaza la hipótesis de no cointegración en la tercera etapa, con un vector de cointegración $\theta = (\theta_2, \dots, \theta_k)'$, puede suceder:

b1) $\theta_i = \delta_i - \phi_i$ ($i = 2, \dots, k$) por lo que:

$$(6) \quad d_t - \sum_{j=2}^k (\delta_j - \phi_j) \rho_{jt} = \sum_{j=1}^k \phi_j \left(\sum_{i=2}^{n_j} (\delta_i^j - \phi_i^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_i^j d_{it}^j \right) \sim I(0)$$

así, adicionalmente, pueden darse dos casos:

- b1a)* que todos los términos de la derecha de la expresión (6) sean estacionarios, lo cual implica que la PPP se cumple para cada bien individualmente;
- b1b)* que algunos términos sean no estacionarios pero que haya cointegración entre los mismos. De esta manera, la PPP individual para el precio de cada bien puede incumplirse;

b2) $\theta_i \neq \delta_i - \phi_i$ para algún i . Así:

$$(7) \quad \begin{aligned} d_t - \sum_{j=2}^k \theta_j \rho_{jt} &\neq d_t - \sum_{j=2}^k (\delta_j - \phi_j) \rho_{jt} = \\ &= \sum_{j=1}^k \phi_j \left(\sum_{i=2}^{n_j} (\delta_i^j - \phi_i^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_i^j d_{it}^j \right) \sim I(1) \end{aligned}$$

y la no estacionariedad de d_t puede deberse, además de al efecto de los ρ_{jt} , al de los ρ_{it}^j o al incumplimiento de la PPP para algún bien (algún d_{it}^j no estacionario).

6. EXTENSIÓN DEL MODELO AL ANÁLISIS DE LA CONVERGENCIA ENTRE TASAS DE INFLACIÓN

A partir de las anteriores consideraciones, el modelo desarrollado inicialmente por Johnson puede ser extendido al análisis de la convergencia entre tasas de inflación, medidas éstas a partir de los IPC (índices de Laspeyres). Así, debe extenderse el modelo a fin de considerar los siguientes factores:

- 1) lo apuntado sobre la aplicabilidad del modelo en índices de Laspeyres (apartado 4);
- 2) la utilización de índices de grupos de gasto en lugar de precios individuales (apartado 5);

La hipótesis de convergencia en tasas de inflación de dos economías, una vez considerado el efecto de las variaciones del tipo de cambio, implica que ambas han de tender a la igualdad. En otras palabras, se ha de cumplir que $\pi_t = \pi_t^* + g_t$, donde π_t y π_t^* son las tasas de inflación doméstica y extranjera respectivamente, y g_t es la tasa de variación del tipo de cambio. Si las tasas de inflación doméstica y extranjera están integradas, para que se cumpla la PPP relativa cabe que estén cointegradas con g_t con vector cointegrante $(1, -1, -1)'$ y perturbaciones con media nula. De esta forma, la hipótesis de PPP relativa en un entorno de unión monetaria o de tipos de cambio fijos ($g_t = 0$ para todo t) es equivalente a la hipótesis de convergencia estocástica en tasas de inflación².

El modelo que se desarrollará permitirá determinar si el rechazo de la hipótesis de convergencia es debido a los efectos de cambios relativos entre índices de grupos de gasto o bien a otros factores. Un índice de precios de Laspeyres, I_t , puede descomponerse a fin de considerar k índices de precios de grupos de gasto, $I_t^j (j = 1, \dots, k)$:

$$I_t = \sum_{j=1}^k \alpha_j I_t^j$$

donde:

$$I_t^j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} q_{io}^j p_{it}^j}{\sum_{i=1}^{n_j} q_{io}^j p_{io}^j} \quad \text{y} \quad \alpha_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} q_{io}^j p_{io}^j}{\sum_{i=1}^n q_{io} p_{io}}$$

²Para una introducción al concepto de convergencia estocástica se puede consultar Bernard y Durlauf (1991 y 1994).

Derivando una expresión similar a (3), la tasa interanual de crecimiento del índice de precios agregado de un país o región, π_t , aproximada por la diferencia estacional del logaritmo natural del índice, puede escribirse como:

$$\pi_t \simeq \sum_{j=1}^k \delta_{jt} \pi_t^j$$

donde $\delta_{it} = (\alpha_j I_{t-12}^j) / \left(\sum_{j=1}^k \alpha_j I_{t-12}^j \right)$ y π_t^j es la tasa de crecimiento interanual del índice de precios del grupo de gasto j -ésimo. Asimismo, desarrollando una expresión similar para π_t^j se obtiene:

$$\pi_t^j \simeq \sum_{i=1}^{n_j} \delta_{it}^j \dot{p}_{it}^j$$

donde $\delta_{it}^j = (q_{io}^j p_{it-12}^j) / \left(\sum_{i=1}^{n_j} q_{io}^j p_{it-12}^j \right)$.

Considerando ahora la hipótesis de convergencia entre tasas de inflación, tenemos que d_t tendría que ser estacionario, definido éste como $d_t = \pi_t - \pi_t^*$. Desarrollando esta expresión de forma similar a (4):

$$(8) \quad d_t = \sum_{j=1}^k \delta_{jt} \pi_t^j - \sum_{j=1}^k \phi_{jt} \pi_t^{j*} = \dots = \sum_{j=2}^k (\delta_{jt} - \phi_{jt}) \rho_{jt} + \sum_{j=1}^k \phi_{jt} d_{jt}$$

donde $\rho_{jt} = \pi_t^j - \pi_t^1$ y $d_{jt} = \pi_t^j - \pi_t^{j*}$. Desarrollando ahora la expresión para d_{jt} :

$$(9) \quad d_{jt} = \sum_{i=1}^{n_j} \delta_{it}^j \dot{p}_{it}^j - \sum_{i=1}^{n_j} \phi_{it}^j \dot{p}_{it}^{j*} = \dots = \sum_{i=2}^{n_j} (\delta_{it}^j - \phi_{it}^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_{it}^j d_{it}^j$$

donde $\rho_{it}^j = \dot{p}_{it}^j - \dot{p}_{1t}^j$ y $d_{it}^j = \dot{p}_{it}^j - \dot{p}_{it}^{j*}$. Substituyendo (9) en (8):

$$(10) \quad d_t = \sum_{j=2}^k (\delta_{jt} - \phi_{jt}) \rho_{jt} + \sum_{j=1}^k \phi_{jt} \left(\sum_{i=2}^{n_j} (\delta_{it}^j - \phi_{it}^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_{it}^j d_{it}^j \right)$$

De esta forma, a pesar de que se cumpla la convergencia en tasas de crecimiento interanual de los precios individuales, es decir, que todos los d_{it}^j sean estacionarios, la no estacionariedad de d_t puede deberse a dos tipos de factores:

- 1) al efecto de los cambios relativos entre las tasas de variación interanual de los índices de grupos de gasto combinado con las diferencias de ponderaciones entre índices de grupos de gasto. Es decir, al primer sumatorio de la derecha de (10);

- 2) al efecto de los cambios relativos entre la evolución de los precios dentro de cada grupo de gasto, junto con las diferencias de ponderación entre índices de distintas áreas geográficas. Es decir, al segundo término de la derecha de la expresión (10).

Con el fin determinar si son los cambios relativos entre las tasas de variación interanual de los índices de grupos de gasto (combinado con las diferencias de ponderaciones entre índices de grupos de gasto) los responsables del rechazo de la hipótesis de convergencia (d_t no estacionario) se puede utilizar la misma estrategia de contraste que la sugerida por Johnson:

- 1º) contrastar la integración de los ρ_{jt} ($i = 2, \dots, k$);
- 2º) comprobar que los ρ_{jt} no estacionarios no están cointegrados entre ellos;
- 3º) contrastar que d_t no está cointegrado con los ρ_{jt} ($i = 2, \dots, k$) no estacionarios. El aceptar la hipótesis de no cointegración significa que los cambios de los índices de precios relativos y las diferentes ponderaciones NO son los responsables de la no estacionariedad de d_t . Es decir, que la fuente de no estacionariedad de d_t proviene, además de la de los ρ_{jt} , de la no estacionariedad del segundo término de la derecha de (10), o sea, los d_{it} y los ρ_{it}^j .

Así, se pueden obtener las siguientes conclusiones:

- a) en caso de no rechazar la hipótesis de no cointegración en la tercera etapa del contraste, no se pueden obtener conclusiones por lo que respecta a si son los cambios de los precios relativos la causa de la no estacionariedad de d_t . Lo que sí puede concluirse es que la no estacionariedad no sólo se debe al efecto de los cambios relativos entre tasas de crecimiento de los índices de gasto y a las diferentes ponderaciones de éstos. Un análisis más profundo requerirá analizar si son los cambios relativos de precios dentro de cada índice de grupo de gasto los responsables de la no estacionariedad de d_t , es decir, el término entre corchetes de la derecha de (10) que incluye los ρ_{it}^j .
- b) si se rechaza la hipótesis de no cointegración en la tercera etapa, con un vector de cointegración $\theta = (\theta_2, \dots, \theta_k)'$, puede ocurrir que:

b1) $\theta_i = \delta_{it} - \phi_{it}$ ($i = 2, \dots, k$) por lo que:

$$(11) \quad d_t - \sum_{j=2}^k (\delta_{jt} - \phi_{jt}) \rho_{jt} = \sum_{j=1}^k \phi_{jt} \left(\sum_{i=2}^{n_j} (\delta_{it}^j - \phi_{it}^j) \rho_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_{it}^j d_{it}^j \right) \sim I(0)$$

así, se pueden dar adicionalmente dos casos:

- b1a)* que todos los términos de la derecha de la expresión (11) sean estacionarios, lo cual implica que la convergencia se cumple para la tasa de crecimiento de cada precio individualmente;
- b1b)* que algunos términos sean no estacionarios pero que haya cointegración entre los mismos. De esta forma, la convergencia individual para la tasa de variación del precio de cada bien puede no cumplirse;
- b2)* $\theta_i \neq \delta_{it} - \phi_{it}$ para algún i . Así:

(12)

$$d_t - \sum_{j=2}^k \theta_j p_{jt} \neq d_t - \sum_{j=2}^k (\delta_{jt} - \phi_{jt}) p_{jt} = \sum_{j=1}^k \phi_{jt} \left(\sum_{i=2}^{n_j} (\delta_{it}^j - \phi_{it}^j) p_{it}^j + \sum_{i=1}^{n_j} \phi_{it}^j d_{it}^j \right) \sim I(1)$$

y la no estacionariedad de d_t puede ser debida, además de por el efecto de los p_{jt} , al efecto de los p_{it}^j o al incumplimiento de la convergencia para la tasa de algún bien (algún d_{it}^j no estacionario).

7. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha realizado una extensión del de Johnson (1991) para tratar de explicar los rechazos de la hipótesis de la paridad del poder de compra utilizando índices agregados de precios. Dicho autor introduce la hipótesis de que los rechazos son causados por los cambios relativos entre precios dentro de cada índice, combinado con la utilización de diferentes ponderaciones. Para comprobar dicha hipótesis el autor diseña un contraste, del cual se han mostrado las limitaciones.

Las aportaciones realizadas en este trabajo son, en primer lugar, una interpretación de los resultados del contraste propuesto por el mencionado autor; en segundo lugar, una extensión para índices de Laspeyres; en tercer lugar, la utilización de los índices de grupos de gasto en que se dividen los índices de precios, en lugar de utilizar directamente los cambios relativos entre precios; finalmente, una extensión para intentar explicar los rechazos de la hipótesis de convergencia en tasas de inflación entre diferentes ámbitos geográficos.

De todos los desarrollos propuestos se desprende que el contraste de relaciones de equilibrio entre números índice de precios ponderados presenta la dificultad de que un rechazo de dicha relación de equilibrio no puede interpretarse directamente como un rechazo de la hipótesis económica subyacente (paridad de poder de compra, convergencia en tasas de inflación,...). Dicho rechazo puede ser causado por la combinación de cambios internos entre los precios que constituyen los índices, unido a

las diferencias de ponderación. El intento de comprobar dichos efectos es igualmente difícil debido al elevado número de precios que componen los índices de precios. El intento de solucionar este problema utilizando los índices de grupo de gasto en que se pueden dividir los números índice en general no resuelve dicho problema. Ello es debido a las limitadas conclusiones que se pueden extraer.

REFERENCIAS

- [1] **Artis, M.J. y Nachane, D.** (1990). «Wages and prices in Europe: A test of the German leadership thesis». *Weltwirtschaftliches Archiv*, **126**, 59-76.
- [2] **Bernard, A.B. y Durlauf, S.N.** (1991). «Convergence of international output movements». *NBER Working Papers series*, **3717**.
- [3] **Bernard, A.B. y Durlauf, S.N.** (1994). «Interpreting test of the convergence hypothesis». *NBER Technical Working Papers*, **159**.
- [4] **Caporale G.M. y Pittis, N.** (1993). «Common stochastic trends and inflation convergence in the EMS». *Weltwirtschaftliches Archiv*, **129**, 207-15.
- [5] **Corbae, D. y Ouliaris, S.** (1988). «Cointegration and tests for Purchasing Power Parity». *Review of Economics and Statistics*, **70**, 508-511.
- [6] **Enders, W.** (1988). «ARIMA and cointegration tests of PPP under fixed and flexible exchange rate regimes». *Review of Economics and Statistics*, **70**, 504-508.
- [7] **Enders, W.** (1989). «Unit roots and the real exchange rate before World War I: The case of Britain and the USA». *Journal of International Money and Finance*, **8**, 59-73.
- [8] **Heri, E.W. y Theurillat, M.J.** (1990). «Purchasing Power Parity for the DM: a cointegration exercise». *Kredit und Kapital*, **3, 23**, 333-350.
- [9] **Jonhson, P.A.** (1991). «Aggregate price indexes, cointegration, and tests of the purchasing power parity hypothesis». *Economics Letters*, **36**, 305-309.
- [10] **Kim, Y.** (1990). «PPP in the long run: A cointegration approach». *Journal of Money, Credit and Banking*, **22, 4**.
- [11] **Layton, A.P. y Stark, J.P.** (1990). «Co-integration as an empirical test of Purchasing Power Parity». *Journal of Macroeconomics*, **12**, 125-136.
- [12] **Matea, M^a de los Llanos** (1992). «Contrastes de raíces unitarias para series mensuales. Una aplicación al IPC». *Servicio de Estudios, Banco de España. Documento de Trabajo*, **9214**.

- [13] **McNown, R. y Wallace, M.S.** (1989). «National price levels, Purchasing Power Parity, and cointegration: A tests of four high inflation economies». *Journal of International Money and Finance*, **8**, 533-545.
- [14] **Phillips, P.C.B. y Ouliaris, S.** (1990). «Asymptotic properties of residual based tests for cointegration». *Econometrica*, **58**, 165-193.
- [15] **Phillips, P.C.B. y Perron, P.** (1988). «Testing for a unit root in time series regression». *Biometrika*, **75**, 335-346.
- [16] **Sansó, A. y Suriñach, J.** (1995). «Convergencia a largo plazo entre las tasas de inflación de las Comunidades Autónomas». *Documento de Trabajo*, **95R08**. Departament d'Econometria, Estadística i Economia Espanyola. Universitat de Barcelona.
- [17] **Vega, J.L.** (1991). «Tests de raíces unitarias: aplicación a series de la economía española y al análisis de la velocidad de circulación del dinero (1964-1990)». *Servicio de Estudios, Banco de España. Documento de trabajo*, **9117**.

ENGLISH SUMMARY

TESTING COINTEGRATION RELATIONSHIPS BETWEEN PRICE INDEXES. A NOTE

ANDREU SANSÓ ROSSELLÓ*

MANUEL ARTÍS ORTUÑO*

JORDI SURIÑACH CARALT*

A great deal of works aiming to test different economic hypothesis by means of cointegration analysis has been carried out. Some of these hypothesis establish equilibrium relationships between aggregate price indexes or their transformations (PPP, convergence among inflation rates). Johnson (1991) designs a test in order to try to explain the rejections of the PPP hypothesis using aggregate price indexes and cointegration analysis: the hypothesis can be rejected if there are relative price changes in the indexes and if the countries make use of different weights in constructing the price indexes, although the hypothesis is held for each individual good. Our work includes the enlargement of the analysis introduced by Johnson (consideration of Laspeyres indexes, using indexes of broad components and analysis of convergence among inflation rates). It also shows its limited capacity to draw conclusions about whether the internal changes are responsible for the rejection of the cointegration hypothesis (the PPP hypothesis or the convergence in inflation rates).

AMS Classification: 62P20, 62M10, 90A20

Keywords: Price Indexes, Cointegration, PPP, Convergence.

* Andreu Sansó Rosselló, Manuel Artís Ortuño i Jordi Surinach Caralt. Departament d'Econometria, Estadística i Economia Espanyola. Universitat de Barcelona. Av. Diagonal, 690. 08034 Barcelona.
E-mail: sanso@riscd2.eco.ub.es.

-Received December 1996.

-Accepted September 1997.

A great deal of works aiming to test different economic hypothesis by means of cointegration analysis has already been carried out. Some of these hypothesis establish equilibrium relationships between aggregate price indexes or their transformations (for instance, the Purchasing Power Parity or the convergence among inflation rates). Johnson (1991) designs a test in order to explain the rejections of the PPP hypothesis using aggregate price indexes and cointegration analysis: he concludes that the hypothesis can be rejected if there are relative price changes in the indexes and if the countries make use of different weights in constructing the price indexes, although the hypothesis is held for each individual good.

In order to illustrate this assertion, we assume that there are n different goods ($i = 1, \dots, n$), let p_{it} be the natural logarithm of the domestic price of the good i , let p_{it}^* be the natural logarithm of the foreign price of the good i and e_t the natural logarithm of the exchange rate (domestic currency units per unit of foreign currency). We also assume that p_{it} , p_{it}^* and e_t are first order integrated ($I(1)$). If the PPP hypothesis holds for good i , then $d_{it} = p_{it} - p_{it}^* - e_t$ is stationary. On another hand, when we use aggregate price indexes this can be written as:

$$d_t \equiv p_t - p_t^* - e_t = \sum_{i=2}^n (\delta_i - \phi_i) \rho_{it} + \sum_{i=1}^n \phi_i d_{it}$$

where $p_t = \Sigma \delta_i p_{it}$, $p_t^* = \Sigma \phi_i p_{it}^*$, $\Sigma \delta_i = 1$, $\Sigma \phi_i = 1$, $\rho_{it} = p_{it} - p_{1t}$ and $\rho_{1t} = 0$. If the PPP hypothesis holds for each good, the second term of the right-hand side will be stationary. Besides, it is shown that d_t depends on the relative changes in the domestic prices (ρ_{it}) and on the weight of the different goods in each country (δ_i and ϕ_i). So, if ρ_{it} it is integrated for some i ($i = 2, \dots, n$) and $\delta_i \neq \phi_i$, d_t will be non stationary and the (aggregate) PPP hypothesis will then be rejected. In this manner, the tests of the PPP hypothesis is likely to reject it although it holds for each individual good.

Our work can be considered as an enlargement of Johnson's work. Our contributions are the following: firstly, an interpretation of Johnson's test results and the limitations of this test are shown; secondly, an enlargement for Laspeyres price indexes is presented; thirdly, we use broad component indexes instead of the price relative changes and, finally, our generalization explains the convergence hypothesis rejections in inflation rates of different geographical areas.

It is then concluded, from all the suggested developments, that the rejection of the equilibrium relationship (that is, the cointegration hypothesis) among (some transformations of) indexes of weighted prices cannot be considered as a rejection of the underlying economic hypothesis (Purchasing Power Parity, convergence in inflation rates...). This rejection can be caused by the combination of both the internal changes among the price indexes and the weight differences. The attempt to verify those effects is difficult too due to the high number of individual prices forming the price indexes. The attempt to solve this problem by using the indexes of broad components is not a solution to it. This is mainly due to the limited conclusions that can be drawn.

Investigació Operativa

IMPLEMENTACIÓN DE UN ALGORITMO PRIMAL-DUAL DE ORDEN SUPERIOR MEDIANTE EL USO DE UN MÉTODO PREDICTOR-CORRECTOR PARA PROGRAMACIÓN LINEAL*

J. CASTRO*

Universitat Rovira i Virgili

Se presenta una implementación de un algoritmo primal-dual de punto interior para la solución de problemas lineales. El algoritmo difiere de otros ya existentes (como el implementado en el sistema LoQo) en el hecho de que soluciona las denominadas «ecuaciones normales en forma primal» (LoQo soluciona el denominado «sistema aumentado») y en que realiza una clara distinción entre variables acotadas superior e inferiormente, y aquellas sólo acotadas inferiormente. La eficiencia de la implementación es comparada con el sistema LoQo. Para la comparación se utilizan 80 problemas lineales de la colección Netlib (Gay (1985)) (una batería estándar de problemas de programación lineal). Este trabajo es el primero de una serie de dos, cuyo objetivo es la resolución eficiente de problemas cuadráticos por técnicas de punto interior.

An implementation of a higher-order primal-dual interior point algorithm using a predictor-corrector method for linear programming.

Palabras clave: Algoritmo primal-dual, métodos de punto interior, método predictor-corrector, programación lineal

*Este trabajo ha sido subvencionado por la Ayuda Iberdrola a la Investigación Científica y al Desarrollo Tecnológico 95-005, y por el proyecto CICYT TAP96-1044-J02-93.

*J. Castro. Estadística i Investigació Operativa. Dept. d'Enginyeria Química. Universitat Rovira i Virgili. Autovia de Salou, s/n. 43006 Tarragona.

-Recibido en noviembre de 1996.

-Aceptado en julio de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

Desde la aparición del algoritmo de Karmarkar (Karmarkar (1984)) se ha dedicado un gran esfuerzo al estudio de los métodos de punto interior, debido fundamentalmente a la gran eficiencia que han mostrado tener en la resolución de ciertos tipos de problemas de programación lineal. Ver en Monteiro y Adler (1989) un estudio sobre la convergencia de estos métodos para la solución de problemas lineales. En la actualidad existen diversas implementaciones de carácter práctico, tales como el sistema LoQo (Linear Optimization, Quadratic Optimization), ver Vanderbei (1992).

La implementación presentada en este trabajo difiere del sistema LoQo en dos puntos fundamentalmente. Primero, LoQo utiliza técnicas para matrices simétricas casi definidas, dado que resuelve el denominado «sistema aumentado» (que no es más que una simplificación del sistema de ecuaciones de Karush-Kuhn-Tucker del problema). Por su parte, nuestra implementación utiliza las denominadas «ecuaciones normales en forma primal» (consistentes en una simplificación adicional del «sistema aumentado»); ver en Vanderbei (1996) una descripción de ambas técnicas. En segundo lugar, nuestra implementación realiza una clara distinción entre las variables acotadas superior e inferiormente y aquéllas sólo inferiormente. Se realiza un preprocessamiento en donde se agrupan las variables pertenecientes a cada tipo de variables. Esta reordenación de variables repercute en una mayor eficiencia computacional.

Este trabajo es una extensión de la implementación de un método primal-dual para problemas lineales descrita en Castro (1995). La diferencia entre ambos algoritmos es la inclusión de un método predictor-corrector para la obtención de direcciones de movimiento de orden superior. Este hecho mejora la convergencia del algoritmo, permitiendo que, a diferencia de la presentada en Castro (1995), la nueva implementación sea tan eficiente como el sistema LoQo en la resolución de problemas lineales.

A su vez, este trabajo también es el primero de una serie de dos, cuyo objetivo es la resolución eficiente de problemas cuadráticos por técnicas de punto interior. Los resultados aquí obtenidos son la base para el desarrollo de un algoritmo de punto interior para problemas cuadráticos tal y como se describe en Castro (1998).

El trabajo tiene la siguiente organización. La sección 2 presenta brevemente el algoritmo primal-dual de punto interior para problemas lineales. La sección 3 detalla el cálculo de la nueva dirección de orden superior. La sección 4 discute los resultados computacionales obtenidos en la solución de una batería de 80 problemas lineales. Finalmente, la sección 5 resume las principales conclusiones de este trabajo.

2. ALGORITMO PRIMAL-DUAL DE PUNTO INTERIOR PARA PROBLEMAS LINEALES

En esta sección se presenta brevemente el método primal-dual para problemas lineales implementado en Castro (1995) (dicha implementación será referida como IP).

El problema de minimización primal considerado es:

$$(1) \quad (P) \quad \begin{array}{ll} \min & c_u' x_u + c_l' x_l \\ \text{sujeto a} & A_u x_u + A_l x_l = b \\ & x_u + f = \bar{x}_u \\ & x \geq 0 \\ & f \geq 0 \end{array}$$

donde $c_u, x_u, f \in \mathbb{R}^{n_u}$, $c_l, x_l \in \mathbb{R}^{n_l}$, $c = (c_u', c_l')'$, $x = (x_u', x_l')'$ (por tanto $c, x \in \mathbb{R}^n$, $n = n_u + n_l$), $b \in \mathbb{R}^m$, $A_u \in \mathbb{R}^{m \times n_u}$ y $A_l \in \mathbb{R}^{m \times n_l}$ (por tanto $A = [A_u | A_l] \in \mathbb{R}^{m \times n}$) (observar que todos los elementos _{*u*} corresponden a las variables acotadas superior e inferiormente, mientras que aquéllos denotados con _{*l*} corresponden a variables sólo acotadas inferiormente).

El problema dual asociado puede expresarse como:

$$(2) \quad (D) \quad \begin{array}{ll} \max & b'y - \bar{x}_u' w \\ \text{subj. a} & A_u' y + z_u - w = c_u \\ & A_l' y + z_l = c_l \\ & y \in \mathbb{R}^m \\ & z_l \geq 0 \quad z_u \geq 0 \quad w \geq 0 \end{array}$$

donde $y \in \mathbb{R}^m$, $z = (z_u', z_l')'$ ($z_u \in \mathbb{R}^{n_u}$, $z_l \in \mathbb{R}^{n_l}$, por tanto $z \in \mathbb{R}^n$) y $w \in \mathbb{R}^{n_u}$.

Las condiciones de primer orden a satisfacer por la solución óptima de los problemas (1) y (2) (denominadas condiciones de Karush-Kuhn-Tucker) una vez eliminados los límites inferiores $x \geq 0$, $f \geq 0$, $z \geq 0$ y $w \geq 0$ mediante la introducción de una barrera logarítmica (ver Castro (1995)), son las siguientes:

$$(3) \quad X_u Z_u e_{n_u} = \mu e_{n_u}$$

$$(4) \quad X_l Z_l e_{n_l} = \mu e_{n_l}$$

$$(5) \quad A_u x_u + A_l x_l = b$$

$$(6) \quad A_l' y + z_l = c_l$$

$$(7) \quad F W e_{n_u} = \mu e_{n_u}$$

$$(8) \quad A_u' y + z_u - w = c_u$$

donde e_l denota el vector *l*-dimensional de 1's, y X_u , X_l , Z_u , Z_l , W , F son matrices

diagonales, definidas como:

$$\begin{aligned}
 e_l &= (1, \dots, 1_l)' \\
 X_u &= \text{diag}(x_{u_1}, \dots, x_{u_{n_u}}) \\
 X_l &= \text{diag}(x_{l_1}, \dots, x_{l_{n_l}}) \\
 Z_u &= \text{diag}(z_{u_1}, \dots, z_{u_{n_u}}) \\
 Z_l &= \text{diag}(z_{l_1}, \dots, z_{l_{n_l}}) \\
 W &= \text{diag}(w_1, \dots, w_{n_u}) \\
 F &= \text{diag}(\bar{x}_{u_1} - x_{u_1}, \dots, \bar{x}_{u_{n_u}} - x_{u_{n_u}})
 \end{aligned} \tag{9}$$

Los dos siguientes apartados presentan la modificación que se propone al algoritmo original basado en el primal-dual para IP, y los resultados computacionales obtenidos con la nueva variante.

3. INTRODUCCIÓN DE INFORMACIÓN DE SEGUNDO ORDEN

La solución del modelo (3)–(8) presentada en Castro (1995), e implementada en IP, resuelve el sistema anterior mediante el método de Newton. Se resuelve a cada iteración i el sistema $J(\xi_i)d\xi_i = -f(\xi_i)$, siendo $d\xi_i$ la dirección de Newton, y $J(\xi_i)$ y $f(\xi_i)$ el jacobiano del sistema y su evaluación en el punto actual $\xi_i = (x'_i, y'_i, z'_i, w'_i)'$. El sistema a resolver es en este caso:

$$\begin{aligned}
 Z_u dx_u + X_u dz_u &= \mu e_{n_u} - X_u Z_u e_{n_u} \\
 Z_l dx_l + X_l dz_l &= \mu e_{n_l} - X_l Z_l e_{n_l} \\
 -W dx_u + F dw &= \mu e_{n_u} - W F e_{n_u} \\
 A_u dx_u + A_l dx_l &= b - Ax \\
 A'_u dy + dz_u - dw &= c_u - A'_u y - z_u + w \\
 A'_l dy + dz_l &= c_l - A'_l y - z_l
 \end{aligned} \tag{10}$$

Se puede mejorar la efectividad del algoritmo, mediante la resolución del sistema (3)–(8), considerando $f_j(\xi_i + d\xi_i) = 0 \quad j = 1, \dots, 6$ y una aproximación cuadrática para cada $f_j()$, tal que:

$$f_j(\xi_i) + \nabla f_j(\xi_i)' d\xi_i + \frac{1}{2} d\xi_i' \nabla^2 f_j(\xi_i) d\xi_i = 0 \quad j = 1, \dots, 6 \tag{11}$$

En este caso, puede comprobarse que el sistema de ecuaciones a resolver a cada iteración viene dado por:

$$\begin{aligned}
 Z_u dx_u + X_u dz_u + dZ_u dx_u &= \mu e_{n_u} - X_u Z_u e_{n_u} \\
 Z_l dx_l + X_l dz_l + dZ_l dx_l &= \mu e_{n_l} - X_l Z_l e_{n_l}
 \end{aligned}$$

$$(12) \quad \begin{aligned} -Wdx_u + Fdw - dWdx_u &= \mu e_{n_u} - WFe_{n_u} \\ A_u dx_u + A_l dx_l &= b - Ax \\ A'_u dy + dz_u - dw &= c_u - A'_u y - z_u + w \\ A'_l dy + dz_l &= c_l - A'_l y - z_l \end{aligned}$$

Se puede observar cómo la única diferencia entre (12) y (10) se debe a la introducción de los términos no lineales $dZ_u dx_u$, $dZ_l dx_l$ y $dW dx_u$ en las tres primeras ecuaciones de (12). La forma clásica de solucionar este sistema, propuesta inicialmente en Mehrotra (1990) (ver también Lustig *et al.* (1992), Vanderbei (1994)), consiste en realizar dos pasos, denominados el paso predictor y el paso corrector. En el paso predictor se obtiene una dirección $\hat{d}\xi_i$ aproximada, mediante la solución del sistema (12) eliminando las no linealidades y los términos μ :

$$(13) \quad \begin{aligned} Z_u \hat{d}x_u + X_u \hat{d}z_u &= -X_u Z_u e_{n_u} \\ Z_l \hat{d}x_l + X_l \hat{d}z_l &= -X_l Z_l e_{n_l} \\ -W \hat{d}x_u + F \hat{d}w &= -WFe_{n_u} \\ A_u \hat{d}x_u + A_l \hat{d}x_l &= b - Ax \\ A'_u \hat{d}y + \hat{d}z_u - \hat{d}w &= c_u - A'_u y - z_u + w \\ A'_l \hat{d}y + \hat{d}z_l &= c_l - A'_l y - z_l \end{aligned}$$

Se utiliza la dirección aproximada $\hat{d}\xi_i$ para aproximar los términos no lineales $\hat{d}Z_u \hat{d}x_u$, $\hat{d}Z_l \hat{d}x_l$ y $\hat{d}W \hat{d}x_u$ de (12). Entonces, la dirección $d\xi_i$ a utilizar viene dada por la solución del paso corrector:

$$(14) \quad \begin{aligned} Z_u dx_u + X_u dz_u &= \mu e_{n_u} - X_u Z_u e_{n_u} - \hat{d}Z_u \hat{d}x_u \\ Z_l dx_l + X_l dz_l &= \mu e_{n_l} - X_l Z_l e_{n_l} - \hat{d}Z_l \hat{d}x_l \\ -W dx_u + F dw &= \mu e_{n_u} - WFe_{n_u} + \hat{d}W \hat{d}x_u \\ A_u dx_u + A_l dx_l &= b - Ax \\ A'_u dy + dz_u - dw &= c_u - A'_u y - z_u + w \\ A'_l dy + dz_l &= c_l - A'_l y - z_l \end{aligned}$$

Hay que destacar que los términos de la izquierda de los sistemas (13) y (14) son iguales, y tan sólo varían los términos independientes. En Castro (1995) se muestra que este tipo de sistemas de ecuaciones se resuelven mediante:

$$(15) \quad (ASA')dy = b_3 + ASr$$

$$(16) \quad dx = S(A'dy - r)$$

$$(17) \quad dw = F^{-1}(b_2 + Wdx_u)$$

$$(18) \quad dz_u = b_{4_u} + dw - A'_u dy$$

$$(19) \quad dz_l = b_{4_l} - A'_l dy$$

donde el vector r y la matriz S se definen como:

$$(20) \quad \begin{aligned} r &= (r'_u, r'_l)' \quad r \in \mathbb{R}^n \quad r_u \in \mathbb{R}^{n_u} \quad r_l \in \mathbb{R}^{n_l} \\ r_u &= F^{-1}b_2 + b_{4_u} - X_u^{-1}b_{1_u} \quad r_l = b_{4_l} - X_l^{-1}b_{1_l} \end{aligned}$$

$$(21) \quad \begin{aligned} S &= \begin{pmatrix} S_u & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & S_l \end{pmatrix} \quad S \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad S_u \in \mathbb{R}^{n_u \times n_u}, \quad S_l \in \mathbb{R}^{n_l \times n_l} \\ S_u &= FX_u(Z_uF + X_uW)^{-1} \quad S_l = Z_l^{-1}X_l \end{aligned}$$

y b_{1_u} , b_{1_l} , b_2 , b_3 , b_{4_u} y b_{4_l} denotan, por este orden, los términos independientes de las ecuaciones de (13) o (14) (según el sistema a resolver).

El punto más costoso consiste en la resolución de un sistema con la matriz ASA' en (15), para lo cual es necesario realizar su factorización de Cholesky. Sin embargo, dicha factorización es la misma tanto para el paso predictor como para el paso corrector. Por tanto, el hecho de introducir un método predictor-corrector, respecto del método original implementado en IP, implica la resolución de un sistema adicional, pero teniendo ya la factorización de Cholesky realizada (por tanto tan sólo debe realizarse una sustitución inversa y una directa adicionales). Este coste computacional extra, sin embargo, permite la introducción de información de segundo orden en la resolución de (3)–(8).

4. RESULTADOS COMPUTACIONALES CON EL MÉTODO PREDICTOR-CORRECTOR

Sea IPPC (Interior Point Predictor-Corrector) la nueva versión del código IP en el que se ha implementado la modificación introducida en el apartado anterior. IPPC es semejante a otros códigos que implementan el mismo algoritmo, como LoQo (Vanderbei (1994)). Sin embargo existen algunas diferencias entre IPPC y LoQo. En primer lugar, IPPC realiza una clara distinción entre las variables acotadas inferior y superiormente y aquéllas sólo acotadas inferiormente, realizando una reordenación previa de variables que agiliza el comportamiento computacional del algoritmo. Además, IPPC no considera las variables de holgura f explícitamente (LoQo sí lo hace) y, en vez de ello, usa en todo momento la relación $f = \bar{x}_u - x_u$. Finalmente, cabe destacar también que IPPC, como se ha indicado anteriormente, resuelve el sistema simétrico y definido positivo ASA' en cada iteración. LoQo, por su parte, resuelve (13) y (14) usando técnicas para matrices simétricas casi-definidas.

El código IPPC (implementado en C) utiliza el procedimiento de IP para la obtención de la longitud de paso primal y dual, actualización del parámetro de la barrera logarítmica, obtención del punto inicial de iteración y detección de la optimalidad del punto actual. La única diferencia es la solución de los sistemas (13) y (14) por parte de IPPC, mientras que IP soluciona (10). Hay que hacer notar, sin embargo, que IPPC

implementa una ligera modificación en el método predictor-corrector expuesto en el apartado anterior: realiza un escalado (el factor de escala es siempre menor que 1.0) de los términos no lineales $\hat{d}Z_u \hat{d}x_u$, $\hat{d}Z_l \hat{d}x_l$ y $\hat{d}W \hat{d}x_u$ de (12), a utilizar en (14) una vez obtenidos en (13), en las primeras iteraciones del algoritmo, simulando una disminución de paso de las direcciones $\hat{d}\zeta_i$. En la práctica, este escalado se ha mostrado como una opción algorítmica ventajosa y ha permitido agilizar el comportamiento del algoritmo, e incluso, en algunos casos, solucionar problemas de estabilidad numérica. Este escalado tan sólo se aplica en las primeras iteraciones del algoritmo, lejos todavía de obtener la factibilidad primal y dual.

Se han utilizado 80 problemas de la colección Netlib (Gay (1985)) para comprobar la eficiencia de IPPC. Las características de estos problemas se muestran en la tabla 1 donde m , n y nel son el número de condiciones, variables y elementos no nulos de la matriz de restricciones.

La tabla 2 recoge el número de iteraciones (niter) y el tiempo computacional (t), en segundos de CPU, requerido por los códigos IPPC, IP y LoQo para resolver los problemas Netlib cuyas dimensiones se han recogido en la tabla 1. El valor óptimo alcanzado no se muestra, dado que no hubo discrepancias entre los tres códigos (el criterio de parada para los tres era de 8 dígitos de igualdad en las funciones primal y dual). Todas las ejecuciones han sido realizadas sobre una SunSparc 10/41 de 64 Mbytes de memoria (32 reales y 32 mapeadas en disco) y aproximadamente 10 Mflops.

Hay que destacar que las versiones actuales desarrolladas de IP e IPPC no permiten solucionar problemas con variables libres (no acotadas), y no realizan ningún tratamiento específico de columnas densas de la matriz de restricciones A (LoQo sí trata ambas situaciones). (En próximas versiones de IPPC se prevé que estos problemas sean solventados.) El hecho de no realizar un tratamiento específico de columnas densas provoca que IP e IPPC no puedan solucionar algunos problemas por falta de memoria (como «fit2p» y «maros-r7»). LoQo, por su parte, ha podido solucionar todos los problemas (es el más robusto de los tres códigos, seguido de IPPC). El tiempo de computación requerido por IPPC es equiparable al de LoQo, y ligeramente inferior en algunos problemas de dimensión elevada que requieren un tiempo de cálculo considerable (p.e., «d2q06c», «pilot», «pilot87»). La última fila nos muestra el valor promedio (número de iteraciones y tiempo de CPU) para cada código. No se han considerado en este promedio los problemas «fit2p» y «maros-r7», dado que ni IP ni IPPC han podido solucionarlos por problemas de memoria. Si comparamos IPPC, IP y LoQo, se observa como IPPC realiza un número de iteraciones equivalente al de LoQo, y es ligeramente más eficiente que aquél. IP, por su parte, realiza muchas más iteraciones y tiene un rendimiento claramente inferior. Este hecho ya fue notado en Castro (1995), donde se indicaba que, a pesar de que el tiempo por iteración de IP era menor que el de LoQo, aquél era más ineficiente debido a que realizaba un mayor número de iteraciones.

Tabla 1. Dimensiones de los problemas Netlib

Problema	<i>m</i>	<i>n</i>	<i>nel</i>
25fv47	822	1571	11127
80bau3b	2263	9799	29063
adlittle	57	97	465
afiro	28	32	88
agg	489	163	2541
agg2	517	302	4515
agg3	517	302	4531
bandm	306	472	2659
beaconfd	174	262	3476
blend	75	83	521
bnl1	644	1175	6129
bnl2	2325	3489	16124
boeing1	351	384	3865
boeing2	167	143	1339
bore3d	234	315	1525
brandy	221	249	2150
czprob	930	3523	14173
d2q06c	2172	5167	35674
d6cube	416	6184	43888
degen2	445	534	4449
degen3	1504	1818	26230
e226	224	282	2767
etamacro	401	688	2489
fffff800	525	854	6235
finnis	498	614	2714
fit1d	25	1026	14430
fit1p	628	1677	10894
fit2d	26	10500	138018
fit2p	3001	13525	60784
ganges	1310	1681	7021
gfrd-pnc	617	1092	3467
greenbea	2393	5405	31499
grow15	301	645	5665
grow22	441	946	8318
grow7	141	301	2633
israel	175	142	2358
kb2	44	41	291
lotfi	154	308	1086
maros	847	1443	10006
maros-r7	3137	9408	151120
nesm	663	2923	13988
pilot	1442	3652	43220
pilot87	2031	4883	73804
pilotnov	976	2172	13129
recipe	92	180	752
sc105	106	103	281
sc205	206	203	552
sc50a	51	48	131
sc50b	51	48	119
scagr25	472	500	2029
scagr7	130	140	553
scf xm1	331	457	2612
scf xm2	661	914	5229
scf xm3	991	1371	7846
scorpion	389	358	1708
scrs8	491	1169	4029
scsd1	78	760	3148
scsd6	148	1350	5666
scsd8	398	2750	11334
sctap1	301	480	2052
sctap2	1091	1880	8124
sctap3	1481	2480	10734
seba	516	1028	4874
share1b	118	225	1182
share2b	97	79	730
shell	537	1775	4900
ship04l	403	2118	8450
ship04s	403	1458	5810
ship08l	779	4283	17085
ship08s	779	2387	9501
ship12l	1152	5427	21597
ship12s	1152	2763	10941
sierra	1228	2036	9252
standata	360	1075	3038
standgub	362	1184	3147
standmps	468	1075	3686
stocfor1	118	111	474
stocfor2	2158	2031	9492
wood1p	245	2594	70216
woodw	1099	8405	37478

Tabla 2. Efectividad de los sistemas IPPC, IP y LoQo

Problema	IPPC		IP		LoQo	
	niter	t	niter	t	niter	t
25fv47	27	16.6	45	23.9	29	20.6
80bau3b	33	41.4	71	61.3	44	52.2
adlittle	15	0.1	20	0.1	14	0.1
afiro	10	0.0	13	0.0	13	0.0
agg	29	5.2	43	6.8	26	1.8
agg2	26	7.5	37	9.5	22	4.3
agg3	36	9.5	39	9.8	22	4.3
bandm	21	1.2	34	1.5	20	1.5
beaconfd	13	1.1	18	1.3	14	1.0
blend	15	0.1	20	0.1	14	0.2
bnl1	28	5.2	51	7.5	35	7.0
bnl2	39	85.9	61	124.7	40	122.5
boeing1	28	3.2	44	4.0	28	2.8
boeing2	25	0.8	32	0.8	28	0.9
bore3d	16	0.7	29	0.9	17	0.8
brandy	24	1.1	29	1.2	22	1.3
czprob	45	11.9	56	12.8	38	10.2
d2q06c	34	167.2	58	263.6	36	249.0
d6cube	43	72.5	51	80.8	23	75.6
degen2	14	4.9	26	6.7	14	4.6
degen3	24	136.9	38	165.6	17	74.8
e226	24	1.2	39	1.7	22	1.3
etamacro	29	3.8	49	5.6	30	10.0
fffff800	53	13.1	78	17.8	36	11.2
finnis	25	2.0	42	2.7	26	2.3
fit1d	28	2.9	56	4.8	21	4.8
fit1p	16	258.4	26	381.6	26	4.5
fit2d	24	28.2	48	44.7	24	195.0
fit2p	(a)		(a)		24	38.5
ganges	26	11.7	41	15.2	23	11.1
gfrd-pnc	38	1.6	55	1.9	19	1.4
greenbea	62	93.6	94 ^(b)	126.8	47	87.1
grow15	19	1.9	24	2.0	23	2.8
grow22	19	3.0	25	3.3	28	5.1
grow7	17	0.7	23	0.8	20	1.1
israel	45	8.4	71	12.3	28	1.2
kb2	19	0.1	28	0.1	21	0.2
lotfi	21	0.5	29	0.5	25	0.7
maros	49	18.7	65	22.2	28	14.2
maros-r7	(a)		(a)		22	3603.3

(a) Memoria insuficiente. (b) Problemas de convergencia.

Tabla 2. (cont.) Resultados de los problemas Netlib lineales con IPPC, IP y LoQo

Problema	IPPC		IP		LoQo	
	niter	t	niter	t	niter	t
nesm	42	14.9	65	19.4	38	23.3
pilot	48	365.5	72	520.5	44	489.6
pilot87	54	1650.7	79	2312.7	46	1976.0
pilotnov	31	33.0	40	40.1	29	40.6
recipe	11	0.1	18	0.1	13	0.2
sc105	12	0.1	15	0.1	14	0.1
sc205	13	0.2	17	0.2	17	0.3
sc50a	11	0.0	15	0.0	14	0.1
sc50b	10	0.0	12	0.0	13	0.0
scagr25	21	0.9	47	1.4	18	0.9
scagr7	17	0.1	23	0.2	15	0.2
scf xm1	25	1.4	38	1.7	26	1.9
scf xm2	26	3.5	46	4.8	28	4.0
scf xm3	28	6.7	46	8.4	28	6.8
scorpion	14	0.6	23	0.7	16	0.7
scrs8	22	1.8	37	2.5	23	2.6
scsd1	13	0.4	14	0.3	15	0.9
scsd6	14	0.7	17	0.8	17	1.4
scsd8	13	1.8	17	1.8	17	2.9
setap1	19	0.7	30	0.8	18	0.8
setap2	17	5.8	33	7.7	16	4.6
setap3	18	9.2	36	11.9	16	5.9
seba	26	47.8	40	68.4	19	1.7
share1b	71	1.0	89	1.0	26	0.7
share2b	14	0.2	20	0.2	14	0.2
shell	39	2.1	32	1.6	25	2.8
ship04l	14	2.3	21	2.4	19	2.6
ship04s	15	1.4	24	1.6	19	1.8
ship08l	18	6.1	27	6.9	20	6.8
ship08s	16	2.9	24	3.3	20	3.3
ship12l	16	8.5	25	10.0	24	8.9
ship12s	16	4.1	25	4.8	22	5.2
sierra	21	6.4	25	6.6	21	6.1
standata	19	1.3	29	1.4	23	1.7
standgub	19	1.2	29	1.4	23	1.9
standmps	28	2.5	42	3.7	32	3.6
stocfor1	18	0.2	22	0.2	17	0.2
stocfor2	28	16.1	45	19.6	31	11.8
wood1p	24	43.6	38	57.1	28	55.9
woodw	30	37.4	51	49.1	27	40.5
Promedio	25	42.4	37	59.0	23	47.5

5. CONCLUSIONES

Basados en la experiencia computacional bastante fuerte, cuyos resultados principales se han obtenido en el apartado anterior, el método presentado en este trabajo se ha mostrado como una alternativa eficiente al sistema LoQo para la solución de problemas lineales. De ello se concluye que el motivo por el cual la implementación IP presentada en Castro (1995) era menos eficiente que LoQo, era precisamente la falta de información de segundo orden en el cálculo de la dirección de movimiento. La introducción de dicha información en IPPC hace que éste claramente supere en rendimiento a IP. Los resultados obtenidos garantizan que la extensión del algoritmo al caso cuadrático permitirá obtener una estrategia de resolución eficiente para este tipo de problemas (tal y como se detalla en Castro (1998)).

6. REFERENCIAS

- [1] **Castro, J.** (1995). «Implementació d'un algorisme primal-dual de punt interior amb fites superiors a les variables», *Qüestiió*, **19**, 1, 2, 3, 233–257.
- [2] **Castro, J.** (1998). «Un algoritmo de punto interior para programación cuadrática a través de problemas equivalentes separables», *Qüestiió*, **22**, 1, 121-146.
- [3] **Gay, D.M.** (1985) «Electronic mail distribution of linear programming test problems». *Mathematical Programming Society COAL Newsletter*, **13**, 10–12.
- [4] **Karmarkar, N.K.** (1984). «A new polynomial time algorithm for linear programming». *Combinatorica*, **4**, 373–395.
- [5] **Lustig, I.J., R.E Marsten and D.F. Shanno** (1992). «On implementing Mehrotra's predictor-corrector interior-point method for linear programming», *SIAM Journal on Optimization*, **2**(3), 435–449.
- [6] **Mehrotra, S.** (1990). «On the implementation of a (primal-dual) interior point method», *Technical Report 90-03 Dept. of Industrial Engineering and Management Science*, Northwestern University, Evanston, IL.
- [7] **Monteiro, R.D.C y I. Adler** (1989). «Interior path following primal-dual algorithms. Part I: linear programming». *Mathematical Programming*, **44**, 27–41.
- [8] **Vanderbei, R.J.** (1992). *LOQO User's Manual*. Princeton University, Princeton, NJ, USA.
- [9] **Vanderbei, R.J.** (1994). *An interior point code for quadratic programming*. Princeton University, Princeton, NJ, USA.
- [10] **Vanderbei, R.J.** (1996). *Linear Programming: Foundations and Extensions*. Kluwer Academic Publishers, Boston.

ENGLISH SUMMARY

AN IMPLEMENTATION OF A HIGHER-ORDER PRIMAL-DUAL INTERIOR POINT ALGORITHM USING A PREDICTOR-CORRECTOR METHOD FOR LINEAR PROGRAMMING*

J. CASTRO*

Universitat Rovira i Virgili

This paper presents an implementation (called IPPC) of a primal-dual interior point algorithm for linear programming. The main differences between the algorithm presented and others, like that implemented in the LoQo package, is that it solves the «normal equations in primal form» instead of the «augmented system», and that a partition of the set of variables is considered, depending on they are just lower bounded or lower and upper bounded. The efficiency of the implementation is compared with that of the LoQo package. The comparison is performed through the solution of 80 problems of the Netlib collection (a standard suite for linear programming). Though it has been stated in the literature that solving the «augmented system» can be more efficient than solving the «normal equations in primal form», the computational results presented show that IPPC is competitive against LoQo. This paper is the first of two, whose aim is the development of an efficient implementation of an interior point algorithm for quadratic programming. IPPC will be used as the starting point for the development of this quadratic programming code.

Keywords: Interior point methods, linear programming, predictor-corrector method, primal-dual algorithm.

*This work has been supported by Iberdrola grant 95-005 and by CICYT project TAP96-1044-J02-93.

* J. Castro. Estadística i Investigació Operativa. Dept. d'Enginyeria Química. Universitat Rovira i Virgili. Autovia de Salou, s/n. 43006 Tarragona.

-Received November 1996.

-Accepted July 1997.

This paper presents an implementation of a primal-dual interior point algorithm for linear problems (named IPPC). This implementation is an extension of a previous one (denoted as IP) presented in Castro (1995). The main feature of IPPC compared to IP is the inclusion of higher order information when computing the direction of movement, using, as usual, a predictor-corrector strategy. This has considerably increased the performance of the solver. IPPC has been employed as the starting point for the development of an efficient solver for quadratic problems in a later work.

The main features of IPPC are as follows:

1. it considers a partition of the set of variables depending on they are just lower bounded and lower and upper bounded, leading us to the solution of the following primal problem

$$(P) \quad \begin{array}{ll} \min & c_u^T x_u + c_l^T x_l \\ \text{sujeto a} & A_u x_u + A_l x_l = b \\ & x_u + f = \bar{x}_u \\ & x \geq 0 \\ & f \geq 0 \end{array}$$

2. the algorithm solves the commonly called «normal equations in primal form», instead of the «augmented system», thus solving at each iteration of the algorithm the following symmetric positive definite kind of systems

$$(ASA')dy = \bar{b}$$

A being the constraints matrix, S a diagonal positive matrix, and dy the dual direction.

In this last point IPPC differs substantially from other interior point solvers, like LoQo, which solves the «augmented system». Though it has been stated in the literature that solving the indefinite symmetric augmented system can be more efficient than solving the positive definite primal normal equations, the computational results presented in the paper show that an accurate implementation based on the last technique can be as efficient as a solver based on the augmented system.

The first section of the document presents a brief overview of the state of the art, and details the main differences between IPPC and the LoQo package. The second section briefly outlines the primal-dual interior methodology, as implemented in IP, showing the first order necessary Karush-Kuhn-Tucker conditions to be satisfied by the optimizer. This algorithm is the basis for IPPC. The third section describes the classical predictor-corrector technique, and shows how this has been incorporated in the context of IPPC. Finally, section four presents and discusses the computational results obtained with IP, IPPC and LoQo over a battery of 80 linear problems extracted from the standard Netlib collection.

Looking at the computational results presented, it can be stated that IPPC is, at least, as efficient as LoQo in the solution of linear problems. In fact, IPPC has clearly outperformed his predecessor IP, which was not competitive compared to LoQo. Thus, using the predictor-corrector strategy has shown to be instrumental in the performance of IPPC.

UN ALGORITMO DE PUNTO INTERIOR PARA PROGRAMACIÓN CUADRÁTICA A TRAVÉS DE PROBLEMAS EQUIVALENTES SEPARABLES*

J. CASTRO*

Universitat Rovira i Virgili

Se presenta un algoritmo de punto interior para la solución de problemas cuadráticos simétricos y definidos positivos, mediante su transformación en problemas equivalentes separables (esto es, la matriz de coeficientes cuadráticos es diagonal y no existen términos cruzados). El algoritmo difiere de otros ya existentes (como el implementado en el sistema LoQo) en el hecho de que soluciona las denominadas «ecuaciones normales en forma primal» (LoQo soluciona el denominado «sistema aumentado») y en que no requiere ningún tratamiento específico para las variables libres creadas durante la obtención del problema equivalente separable. Se presenta una implementación del algoritmo y su eficiencia es comparada con los sistemas LoQo y Minos 5.3. Para la comparación se utilizan 80 problemas cuadráticos derivados de problemas lineales de la colección Netlib (Gay (1985)) (una batería estándar de problemas de programación lineal). Se obtienen los problemas cuadráticos mediante un generador ad-hoc de problemas cuadráticos.

An interior-point algorithm for quadratic programming through separable equivalent problems.

Palabras clave: Algoritmo primal-dual, métodos de punto interior, método predictor-corrector, programación cuadrática

*Este trabajo ha sido subvencionado por la Ayuda Iberdrola a la Investigación Científica y al Desarrollo Tecnológico 95-005, y por el proyecto CICYT TAP96-1044-J02-93.

*J. Castro. Estadística i Investigació Operativa. Dept. d'Enginyeria Química. Universitat Rovira i Virgili. Autovia de Salou, s/n. 43006 Tarragona.

-Recibido en noviembre de 1996.

-Aceptado en julio de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

Desde la aparición del algoritmo de Karmarkar (Karmarkar (1984)) se ha dedicado un gran esfuerzo al estudio de los métodos de punto interior, debido fundamentalmente a la gran eficiencia que han mostrado tener en la resolución de ciertos tipos de problemas de programación lineal. Ver en Kranich (1991) una extensa recopilación bibliográfica sobre métodos de punto interior. Ver en Terlaky (1996) los últimos avances conseguidos en este campo.

Durante los primeros años de estudio, los métodos de punto interior fueron aplicados con éxito a problemas de programación lineal. Ver en Monteiro y Adler (1989) un estudio sobre la convergencia de estos métodos para la solución de problemas cuadráticos. Existen diversas implementaciones de carácter práctico, tales como el sistema LoQo (Linear Optimization, Quadratic Optimization), ver Vanderbei (1992).

El algoritmo presentado en este trabajo difiere del implementado en LoQo en tres puntos fundamentalmente. Primero, LoQo utiliza técnicas para matrices simétricas casi-definidas, dado que resuelve el denominado «sistema aumentado» (que no es más que una simplificación del sistema de ecuaciones de Karush-Kuhn-Tucker del problema). Por su parte, nuestro algoritmo utiliza las denominadas «ecuaciones normales en forma primal» (consistentes en una simplificación adicional del «sistema aumentado»); ver en Vanderbei (1996) una descripción de ambas técnicas. En contra del sentir general en la literatura (ver Vanderbei y Carpenter (1993)) que considera que la utilización del «sistema aumentado» reduce el incremento de la degradación de la esparsidad (i.e., poca densidad) del sistema de ecuaciones, en este trabajo se muestra como el uso de las «ecuaciones normales en forma primal» puede dar lugar a mejores rendimientos computacionales. Esto es debido a que, a pesar de tener un aumento en la degradación de la esparsidad, este hecho se ve compensado por la solución de un sistema más simplificado. Asimismo, las «ecuaciones normales en forma primal» también son utilizadas en otras implementaciones eficientes, como OB1 (Lustig *et al.* (1992)).

El segundo punto en donde ambos métodos difieren es en el preproceso previo a la solución del problema, dado que cada método resuelve un sistema de ecuaciones distinto. La utilización de las «ecuaciones normales en forma primal» en nuestro método, fuerza a transformar el problema original en uno equivalente separable. De otro modo, el coste computacional sería excesivo y no podrían obtenerse implementaciones competitivas. Por su parte, la estrategia implementada en LoQo permite tanto transformar el problema en uno equivalente separable como solucionar el problema en su forma original. En este sentido, ofrece una mayor flexibilidad. Sin embargo, tal y como se mostrará en los resultados obtenidos, la implementación de nuestro algoritmo obtiene, en general, mejores rendimientos que LoQo, tanto si éste soluciona el problema original o uno transformado.

El tercer punto a destacar es el tratamiento de las variables cuadráticas libres (éstas aparecen al transformar el problema en uno equivalente separable). LoQo (ver Vanderbei y Carpenter (1993)) efectúa un tratamiento específico para este tipo de variables. El método propuesto en este trabajo, sin embargo, no requiere dicho tratamiento, lo cual permite agilizar su rendimiento.

Este trabajo es una extensión de la implementación de un algoritmo primal-dual para problemas lineales, utilizando un método predictor-corrector descrito en Castro (1998) (que a su vez es una extensión del presentado en Castro (1995)). El trabajo tiene la siguiente organización: la sección 2 recoge la extensión del algoritmo presentado en Castro (1998) al caso cuadrático; la sección 3 detalla la transformación del problema original en uno equivalente y separable; la sección 4 presenta el generador de problemas cuadráticos, la sección 5 discute los resultados computacionales obtenidos en la solución de una batería de 80 problemas cuadráticos; finalmente, la sección 6 ofrece las conclusiones obtenidas de los resultados de este trabajo.

2. ALGORITMO PRIMAL-DUAL PREDICTOR-CORRECTOR PARA PROBLEMAS CUADRÁTICOS

En este apartado se describe el algoritmo primal-dual para problemas cuadráticos como extensión del algoritmo presentado en Castro (1998). De nuevo, la principal diferencia entre el algoritmo aquí detallado y el utilizado por LoQo reside en la solución de las «ecuaciones normales en forma primal», en vez del «sistema aumentado». Para el caso cuadrático se verá cómo este hecho tiene unas repercusiones mayores que para el caso lineal, forzando a transformar el problema cuadrático original en uno equivalente separable.

2.1. Formulación de los problemas primal y dual

Sea la siguiente formulación general del problema cuadrático (en forma primal):

$$(1) \quad (P) \quad \begin{aligned} & \min_x \quad c'x + \frac{1}{2}x'Qx \\ & \text{sujeto a} \quad A_u x_u + A_l x_l + A_f x_f = b \\ & \quad \quad \quad 0 \leq x_u \leq \bar{x}_u \\ & \quad \quad \quad 0 \leq x_l \\ & \quad \quad \quad x_f \text{ libre} \end{aligned}$$

donde $x \in \mathbb{R}^n$ representa el vector de variables, el cual puede ser particionado como $x' = (x'_u \ x'_l \ x'_f)$ ($x_u \in \mathbb{R}^{n_u}$ corresponde a las variables con límites superiores e inferiores, $x_l \in \mathbb{R}^{n_l}$ denota las variables sólo acotadas inferiormente, y $x_f \in \mathbb{R}^{n_f}$ representa las variables libres —por lo tanto, $n_u + n_l + n_f = n$). $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ es una matriz simétrica y definida positiva con los costes cuadráticos, y $c \in \mathbb{R}^n$ es el vector de costes lineales. La matriz de restricciones $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ se encuentra particionada según los tres tipos

de variables en $A_u \in \mathbb{R}^{m \times n_u}$, $A_l \in \mathbb{R}^{m \times n_l}$ y $A_f \in \mathbb{R}^{m \times n_f}$. b es el vector de términos independientes, y \bar{x}_u es el vector de los límites superiores de las variables x_u .

Añadiendo variables de holgura $f \in \mathbb{R}^{n_u}$ para las variables acotadas superiormente, sea la siguiente expresión del problema (1) en la forma estándar:

$$(2) \quad (P) \quad \begin{array}{ll} \min_{x,f} & c'x + \frac{1}{2}x'Qx \\ \text{sujeto a} & A_u x_u + A_l x_l + A_f x_f = b \\ & x_u + f = \bar{x}_u \\ & x_u \geq 0, x_l \geq 0, f \geq 0, x_f \text{ libre} \end{array}$$

Considerando una partición del vector c y de la matriz Q de acuerdo con los tres tipos de variables $x' = (x'_u \ x'_l \ x'_f)$, resulta que $c' = (c'_u \ c'_l \ c_f)$ y

$$(3) \quad Q = \begin{pmatrix} Q_u & Q'_{ul} & Q'_{uf} \\ Q'_{ul} & Q_l & Q'_{lf} \\ Q'_{uf} & Q'_{lf} & Q_f \end{pmatrix}$$

El dual de (2) tiene la expresión:

$$(4) \quad (D) \quad \begin{array}{ll} \max_{y,z,w} & b'y - \bar{x}'_u w - \frac{1}{2}x'Qx \\ \text{sujeto a} & A'_u y - (Q_u x_u + Q'_{ul} x_l + Q'_{uf} x_f) + z_u - w = c_u \\ & A'_l y - (Q_{ul} x_u + Q_l x_l + Q'_{lf} x_f) + z_l = c_l \\ & A'_f y - (Q_{uf} x_u + Q_{lf} x_l + Q_f x_f) = c_f \\ & z_u \geq 0, z_l \geq 0, w \geq 0, y \text{ libre} \end{array}$$

donde $y \in \mathbb{R}^m$ son las variables duales asociadas con el primer grupo de restricciones de (2), y $z_u \in \mathbb{R}^{n_u}$, $z_l \in \mathbb{R}^{n_l}$ y $w \in \mathbb{R}^{n_u}$ son las variables de holgura duales.

Nota: observar que las variables x_u tienen asociadas las holguras duales z_u y w , las variables x_l únicamente tienen asociadas las holguras duales z_l , y las variables libres x_f no tienen ninguna holgura dual asociada.

2.2. Obtención de las funciones Lagrangianas a través de una barrera logarítmica

Una vez formulados los problemas primal y dual, se pueden eliminar las restricciones de no-negatividad de las variables añadiendo una barrera logarítmica. El problema primal tendrá la siguiente expresión:

$$(5) \quad \begin{array}{ll} \min & c'x + \frac{1}{2}x'Qx - \mu \sum_{i=1}^{n_u+n_l} \ln x_i - \mu \sum_{i=1}^{n_u} \ln(\bar{x}_{u_i} - x_{u_i}) \\ \text{sujeto a} & Ax = b \\ & \mu \geq 0 \end{array}$$

mientras que el dual puede formularse como:

$$(6) \quad \begin{aligned} \max & \quad b'y - \frac{1}{2}x'Qx - \bar{x}'_u w + \mu \sum_{i=1}^{n_u+n_l} \ln z_i + \mu \sum_{i=1}^{n_u} \ln w_i \\ \text{sujeto a} & \quad A'_u y - (Q_{ul}x_u + Q'_{ul}x_l + Q'_{uf}x_f) + z_u - w = c_u \\ & \quad A'_l y - (Q_{ul}x_u + Q_l x_l + Q'_{lf}x_f) + z_l = c_l \\ & \quad A'_f y - (Q_{uf}x_u + Q_{lf}x_l + Q_f x_f) = c_f \\ & \quad y \text{ libre, } \mu \geq 0 \end{aligned}$$

A continuación, asociando los multiplicadores de Lagrange $y \in \mathbb{R}^m$ a las restricciones de igualdad de (5) se obtiene la función Lagrangiana L_p del problema primal:

$$(7) \quad L_p(x, y, \mu) = c'x + \frac{1}{2}x'Q - \mu \sum_{i=1}^{n_u+n_l} \ln x_i - \mu \sum_{i=1}^{n_u} \ln(\bar{x}_{u_i} - x_{u_i}) - y'(Ax - b)$$

Análogamente, asociando los multiplicadores $x_u \in \mathbb{R}^{n_u}$, $x_l \in \mathbb{R}^{n_l}$ y $x_f \in \mathbb{R}^{n_f}$ a las restricciones de igualdad de (6), se obtiene la función Lagrangiana del dual L_d :

$$(8) \quad \begin{aligned} L_d(x, y, z, w, \mu) = & b'y - \frac{1}{2}x'Qx - \bar{x}'_u w + \mu \sum_{i=1}^{n_u+n_l} \ln z_i + \mu \sum_{i=1}^{n_u} \ln w_i \\ & - x'_u(A'_u y - (Q_{ul}x_u + Q'_{ul}x_l + Q'_{uf}x_f) + z_u - w - c_u) \\ & - x'_l(A'_l y - (Q_{ul}x_u + Q_l x_l + Q'_{lf}x_f) + z_l - c_l) \\ & - x'_f(A'_f y - (Q_{uf}x_u + Q_{lf}x_l + Q_f x_f) - c_f) \end{aligned}$$

2.3. Condiciones de optimalidad de Karush-Kuhn-Tucker de primer orden

Sea e_l el vector l -dimensional de 1's y X_u , X_l , X_f , X , Z_u , Z_l , W , F las matrices diagonales, definidas como:

$$(9) \quad \begin{aligned} e_l &= (1_1, \dots, 1_l)' \\ X_u &= \text{diag}(x_{u_1}, \dots, x_{u_{n_u}}) \\ X_l &= \text{diag}(x_{l_1}, \dots, x_{l_{n_l}}) \\ X_f &= \text{diag}(x_{f_1}, \dots, x_{f_{n_f}}) \\ X &= \begin{pmatrix} X_u & & \\ & X_l & \\ & & X_f \end{pmatrix} \\ Z_u &= \text{diag}(z_{u_1}, \dots, z_{u_{n_u}}) \\ Z_l &= \text{diag}(z_{l_1}, \dots, z_{l_{n_l}}) \\ W &= \text{diag}(w_1, \dots, w_{n_u}) \\ F &= \text{diag}(\bar{x}_{u_1} - x_{u_1}, \dots, \bar{x}_{u_{n_u}} - x_{u_{n_u}}) \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta la estructura de Q presentada en (3), las condiciones de optimidad necesarias de primer orden de L_p (7) tienen la siguiente expresión:

$$(10) \quad \frac{\partial L_p}{\partial x_u} = c_u - \mu X_u^{-1} e_{n_u} + \mu F^{-1} e_{n_u} - A'_u y + (Q_u x_u + Q'_{ul} x_l + Q'_{uf} x_f) := 0$$

$$(11) \quad \frac{\partial L_p}{\partial x_l} = c_l - \mu X_l^{-1} e_{n_l} - A'_l y + (Q_{ul} x_u + Q_l x_l + Q'_{lf} x_f) := 0$$

$$(12) \quad \frac{\partial L_p}{\partial x_f} = c_f - A'_f y + (Q_{uf} x_u + Q_{lf} x_l + Q_f x_f) := 0$$

$$(13) \quad \frac{\partial L_p}{\partial y} = -(Ax - b) := 0$$

Por otro lado, las condiciones de optimalidad de primer orden de L_d (8) tienen la expresión:

$$(14) \quad \frac{\partial L_d}{\partial x_u} = c_u - A'_u y - z_u + w + (Q_u x_u + Q'_{ul} x_l + Q'_{uf} x_f) := 0$$

$$(15) \quad \frac{\partial L_d}{\partial x_l} = c_l - A'_l y - z_l + (Q_{ul} x_u + Q_l x_l + Q'_{lf} x_f) := 0$$

$$(16) \quad \frac{\partial L_d}{\partial x_f} = c_f - A'_f y + (Q_{uf} x_u + Q_{lf} x_l + Q_f x_f) := 0$$

$$(17) \quad \frac{\partial L_d}{\partial y} = b - Ax := 0$$

$$(18) \quad \frac{\partial L_d}{\partial z_u} = \mu Z_u^{-1} e_{n_u} - X_u e_{n_u} := 0$$

$$(19) \quad \frac{\partial L_d}{\partial z_l} = \mu Z_l^{-1} e_{n_l} - X_l e_{n_l} := 0$$

$$(20) \quad \frac{\partial L_d}{\partial w} = \mu W^{-1} e_{n_u} - F e_{n_u} := 0$$

Las condiciones (13) y (17) son las mismas e imponen la factibilidad primal. Las condiciones (14)–(16) imponen la factibilidad dual. Las condiciones (18)–(20), denominadas condiciones de complementariedad, garantizan que la solución verifique las condiciones de holgura complementaria. Finalmente, puede observarse que, garantizándose la factibilidad primal, la factibilidad dual y la complementariedad, automáticamente quedan satisfechas las condiciones restantes (10)–(12). Por ejemplo, para (10) se puede observar que:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{?}{=} c_u - \mu X_u^{-1} e_{n_u} + \mu F^{-1} e_{n_u} - A'_u y + (Q_u x_u + Q'_{ul} x_l + Q'_{uf} x_f) \\ &= -\mu X_u^{-1} e_{n_u} + \mu F^{-1} e_{n_u} + z_u - w && [\text{usando (14)}] \\ &= 0 && [\text{usando (18) y (20)}] \end{aligned}$$

De igual forma puede verificarse que se satisfacen (11) y (12).

Finalmente, las condiciones necesarias de Karush-Kuhn-Tucker de primer orden del problema cuadrático (1) (condiciones de factibilidad primal, factibilidad dual y complementariedad) a satisfacer por la solución óptima tienen la siguiente expresión:

$$(21) \quad f_1 \equiv X_u Z_u e_{n_u} - \mu e_{n_u} = 0$$

$$(22) \quad f_2 \equiv X_l Z_l e_{n_l} - \mu e_{n_l} = 0$$

$$(23) \quad f_3 \equiv F W e_{n_u} - \mu e_{n_u} = 0$$

$$(24) \quad f_4 \equiv Ax - b = 0$$

$$(25) \quad f_5 \equiv A'_u y + z_u - w - (Q_{ul} x_u + Q'_{ul} x_l + Q'_{uf} x_f) - c_u = 0$$

$$(26) \quad f_6 \equiv A'_l y + z_l - (Q_{ul} x_u + Q_l x_l + Q'_{lf} x_f) - c_l = 0$$

$$(27) \quad f_7 \equiv A'_f y - (Q_{uf} x_u + Q_{lf} x_l + Q_f x_f) - c_f = 0$$

2.4. Solución del sistema no lineal

Se resuelve el sistema no lineal de ecuaciones (21)–(27) mediante un método iterativo. Una buena elección consistiría en usar el método de Newton, partiendo del punto actual $\xi'_i = (x'_i, y'_i, z'_i, w'_i)$ a un nuevo punto $\xi_i + d\xi_i$, donde las sucesivas direcciones $d\xi_i$ se obtienen como solución del sistema $\nabla f(\xi_i) d\xi_i = -f(\xi_i)$. Sin embargo, tal y como se describe para el caso lineal en Castro (1998), puede aprovecharse información de segundo orden y realizar una aproximación cuadrática de $f_j(\xi_i + d\xi_i) = 0 \quad j = 1, \dots, 7$ (f_j hace referencia a cada una de las ecuaciones de (21)–(27)), obteniendo:

$$(28) \quad f_j(\xi_i) + \nabla f_j(\xi_i)' d\xi_i + \frac{1}{2} d\xi_i' \nabla^2 f_j(\xi_i) d\xi_i = 0 \quad j = 1, \dots, 7$$

Aplicando (28) al sistema (21–27), el nuevo sistema será:

$$(29) \quad \begin{aligned} Z_u dx_u + X_u dz_u + dZ_u dx_u &= -f_1(\xi_i) \\ Z_l dx_l + X_l dz_l + dZ_l dx_l &= -f_2(\xi_i) \\ -W dx_u + F dw - dW dx_u &= -f_3(\xi_i) \\ A_u dx_u + A_l dx_l + A_f dx_f &= -f_4(\xi_i) \\ -Q_u dx_u - Q'_{ul} dx_l - Q'_{uf} dx_f + A'_u dy + dz_u - dw &= -f_5(\xi_i) \\ -Q_{ul} dx_u - Q_l dx_l - Q'_{lf} dx_f + A'_l dy + dz_l &= -f_6(\xi_i) \\ -Q_{uf} dx_u - Q_{lf} dx_l - Q_f dx_f + A'_f dy &= -f_7(\xi_i) \end{aligned}$$

Si se hubiera usado el método de Newton sin introducir información de segundo orden, la única diferencia hubiera sido la no aparición de los términos no lineales $dZ_u dx_u$, $dZ_l dx_l$ y $dW dx_u$. Sin estos términos, el sistema resultante es lineal y puede

ser directamente solucionado. Sin embargo, al introducir la información de segundo orden es preciso utilizar una estrategia alternativa. La forma clásica de solucionar este sistema (propuesta inicialmente en Mehrotra (1990)) consiste en realizar dos pasos, denominados el paso predictor y el paso corrector, tal y como se detalla en Castro (1998). En el paso predictor (tal y como indica su nombre) se obtiene una dirección $\hat{d}\xi_i$ aproximada. Dicha dirección se obtiene como solución del sistema (29) eliminando las no linealidades y los términos μ de los términos independientes de las tres primeras ecuaciones:

$$\begin{aligned}
 Z_u \hat{d}x_u + X_u \hat{d}z_u &= -X_u Z_u e_{n_u} \\
 Z_l \hat{d}x_l + X_l \hat{d}z_l &= -X_l Z_l e_{n_l} \\
 -W \hat{d}x_u + F \hat{d}w &= -W F e_{n_u} \\
 A_u \hat{d}x_u + A_l \hat{d}x_l + A_f \hat{d}x_f &= -f_4(\xi_i) \\
 -Q_u \hat{d}x_u - Q'_{ul} \hat{d}x_l - Q'_{uf} \hat{d}x_f + A'_u \hat{d}y + \hat{d}z_u - \hat{d}w &= -f_5(\xi_i) \\
 -Q_{ul} \hat{d}x_u - Q_l \hat{d}x_l - Q'_{lf} \hat{d}x_f + A'_l \hat{d}y + \hat{d}z_l &= -f_6(\xi_i) \\
 -Q_{uf} \hat{d}x_u - Q_{lf} \hat{d}x_l - Q_f \hat{d}x_f + A'_f \hat{d}y &= -f_7(\xi_i)
 \end{aligned} \tag{30}$$

Se utiliza la dirección aproximada $\hat{d}\xi_i$ para aproximar los términos no lineales $\hat{d}Z_u \hat{d}x_u$, $\hat{d}Z_l \hat{d}x_l$ y $\hat{d}W \hat{d}x_u$ de (29). Entonces, la dirección $d\xi_i$ a utilizar viene dada por la solución del paso corrector:

$$\begin{aligned}
 Z_u dx_u + X_u dz_u &= -f_1(\xi_i) - \hat{d}Z_u \hat{d}x_u \\
 Z_l dx_l + X_l dz_l &= -f_2(\xi_i) - \hat{d}Z_l \hat{d}x_l \\
 -W dx_u + F dw &= -f_3(\xi_i) + \hat{d}W \hat{d}x_u \\
 A_u dx_u + A_l dx_l + A_f dx_f &= -f_4(\xi_i) \\
 -Q_u dx_u - Q'_{ul} dx_l - Q'_{uf} dx_f + A'_u dy + dz_u - dw &= -f_5(\xi_i) \\
 -Q_{ul} dx_u - Q_l dx_l - Q'_{lf} dx_f + A'_l dy + dz_l &= -f_6(\xi_i) \\
 -Q_{uf} dx_u - Q_{lf} dx_l - Q_f dx_f + A'_f dy &= -f_7(\xi_i)
 \end{aligned} \tag{31}$$

Puede observarse cómo los términos de la izquierda de los sistemas (30) y (31) son iguales, y tan sólo varían los términos independientes. Por lo tanto únicamente debe solucionarse el mismo sistema de ecuaciones lineal dos veces con distintos términos independientes.

2.5. Solución del sistema lineal

Sea el siguiente sistema donde los términos de la izquierda son los correspondientes de (30) y (31):

$$\begin{aligned}
(32) \quad & Z_u dx_u + X_u dz_u = b_{1_u} \\
& Z_l dx_l + X_l dz_l = b_{1_l} \\
& -W dx_u + F dw = b_2 \\
& A_u dx_u + A_l dx_l + A_f dx_f = b_3 \\
& -Q_u dx_u - Q'_{ul} dx_l - Q'_{uf} dx_f + A'_u dy + dz_u - dw = b_{4_u} \\
& -Q_{ul} dx_u - Q_l dx_l - Q'_{lf} dx_f + A'_l dy + dz_l = b_{4_l} \\
& -Q_{uf} dx_u - Q_{lf} dx_l - Q_f dx_f + A'_f dy = b_{4_f}
\end{aligned}$$

Para simplificar la obtención de la solución de (32), sea el sistema equivalente:

$$(33) \quad \tilde{Z} dx + X \tilde{d}z = \tilde{b}_1$$

$$(34) \quad -\tilde{W} dx + \tilde{F} dw = \tilde{b}_2$$

$$(35) \quad Adx = b_3$$

$$(36) \quad -Q dx + A' dy + \tilde{d}z - \tilde{d}w = b_4$$

donde ahora todos los términos (matrices o vectores) se encuentran constituidos por tres partes (submatrices o subvectores) asociadas a los tres tipos de variables (u, l, f), de forma que:

$$\begin{aligned}
(37) \quad dx &= \begin{pmatrix} dx_u \\ dx_l \\ dx_f \end{pmatrix} & \tilde{d}z &= \begin{pmatrix} dz_u \\ dz_l \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} & \tilde{d}w &= \begin{pmatrix} dw \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} & \tilde{b}_1 &= \begin{pmatrix} b_{1_u} \\ b_{1_l} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} & \tilde{b}_2 &= \begin{pmatrix} b_2 \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \\
& b_4 & \tilde{Z} &= \begin{pmatrix} Z_u & Z_l & \mathbf{0} \end{pmatrix} & \tilde{W} &= \begin{pmatrix} W & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix} & \tilde{F} &= \begin{pmatrix} F & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Se inicia la solución de (33)–(36) aislando $\tilde{d}w$ de (34) y $\tilde{d}z$ de (36):

$$\begin{aligned}
(38) \quad \tilde{d}w &= \tilde{F}^{-1}(\tilde{b}_2 + \tilde{W} dx) \\
\tilde{d}z &= b_4 + \tilde{d}w + Q dx - A' dy
\end{aligned}$$

Sustituyendo (38) en (33) resulta:

$$\begin{aligned}
(39) \quad & \tilde{Z} dx + X \tilde{d}z = \tilde{b}_1 \\
& \tilde{Z} dx + X(b_4 + \tilde{d}w + Q dx - A' dy) = \tilde{b}_1 \\
& (\tilde{Z} + XQ)dx = \tilde{b}_1 - Xb_4 + XA' dy - X[\tilde{F}^{-1}(\tilde{b}_2 + \tilde{W} dx)] \\
& (\tilde{Z} + XQ)dx = \tilde{b}_1 - Xb_4 + XA' dy - X\tilde{F}^{-1}\tilde{b}_2 - X\tilde{F}^{-1}\tilde{W} dx \\
& (\tilde{Z} + XQ + X\tilde{F}^{-1}\tilde{W})dx = \tilde{b}_1 - Xb_4 + XA' dy - X\tilde{F}^{-1}\tilde{b}_2 \\
& (Q + \tilde{Z}X^{-1} + \tilde{F}^{-1}\tilde{W})dx = X^{-1}\tilde{b}_1 - b_4 + XA' dy - \tilde{F}^{-1}\tilde{b}_2
\end{aligned}$$

Ahora definiendo:

$$(40) \quad \begin{aligned} \Theta &= (Q + \tilde{Z}X^{-1} + \tilde{F}^{-1}\tilde{W}) \\ r &= \tilde{F}^{-1}\tilde{b}_2 + b_4 - X^{-1}\tilde{b}_1 \end{aligned}$$

la expresión (39) puede escribirse como:

$$(41) \quad \Theta dx = A'dy - r$$

Dado que Θ es invertible (ya que es simétrica y definida positiva, puesto que Q también lo es y $\tilde{Z}X^{-1}$, $\tilde{F}^{-1}\tilde{W}$ no son más que matrices diagonales con elementos no negativos), se puede sustituir (41) en (35):

$$(42) \quad \begin{aligned} Adx &= b_3 \\ A[\Theta^{-1}(A'dy - r)] &= b_3 \\ (A\Theta^{-1}A')dy &= b_3 + A\Theta^{-1}r \end{aligned}$$

Por lo tanto, la solución del sistema equivalente (33)–(36) se obtiene calculando por este orden:

$$(43) \quad \begin{aligned} (A\Theta^{-1}A')dy &= b_3 + A\Theta^{-1}r \\ dx &= \Theta^{-1}(A'dy - r) \\ d\tilde{w} &= \tilde{F}^{-1}(\tilde{b}_2 + \tilde{W}dx) \\ \tilde{d}z &= b_4 + d\tilde{w} + Qdx - A'dy \end{aligned}$$

Una vez obtenida la solución del sistema equivalente, es preciso reescribir las ecuaciones de (43) en función de las variables originales, usando (37).

En primer lugar sean las expresiones de Θ y r (40) en base a (3),

$$(44) \quad \begin{aligned} \Theta &= (Q + \tilde{Z}X^{-1} + \tilde{F}^{-1}\tilde{W}) \\ &= Q + \begin{pmatrix} Z_u & & \\ Z_l & \mathbf{0} & \\ \mathbf{0} & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_u^{-1} & & \\ & X_l^{-1} & \\ & & X_f^{-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F^{-1} & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W & & \\ \mathbf{0} & & \\ \mathbf{0} & & \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} Q_u + Z_u X_u^{-1} + F^{-1}W & Q'_{ul} & Q'_{uf} \\ Q_{ul} & Q_l + Z_l X_l^{-1} & Q'_{lf} \\ Q_{uf} & Q_{lf} & Q_f \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r &= \tilde{F}^{-1}\tilde{b}_2 + b_4 - X^{-1}\tilde{b}1 \\
(45) \quad &= \begin{pmatrix} F^{-1} & \\ & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_2 \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_{4_u} \\ b_{4_l} \\ b_{4_f} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} X_u^{-1} & & \\ & X_l^{-1} & \\ & & X_f^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_{1_u} \\ b_{1_l} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} r_u \\ r_l \\ r_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F^{-1}b_2 + b_{4_u} - X_u^{-1}b_{1_u} \\ b_{4_l} - X_l^{-1}b_{1_l} \\ b_{4_f} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

La expresión de $\tilde{d}w$ (38) en las variables originales será:

$$\begin{aligned}
\tilde{d}w &= \tilde{F}^{-1}(\tilde{b}_2 + \tilde{W}dx) \\
(46) \quad &= \begin{pmatrix} F^{-1} & \\ & 1 \\ & & 1 \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} b_2 \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} W & \\ & \mathbf{0} \\ & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx_u \\ dx_l \\ dx_f \end{pmatrix} \right] \\
&= \begin{pmatrix} F^{-1}(b_2 + Wdx_u) \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \\
&\Downarrow \\
&d w = F^{-1}(b_2 + Wdx_u)
\end{aligned}$$

La expresión de $\tilde{d}z$ en las variables originales será:

$$\begin{aligned}
\tilde{d}z &= b_4 + Qdx - A'dy + \tilde{d}w \\
&= \begin{pmatrix} b_{4_u} \\ b_{4_l} \\ b_{4_f} \end{pmatrix} + Q \begin{pmatrix} dx_u \\ dx_l \\ dx_f \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} A'_u \\ A'_l \\ A'_f \end{pmatrix} dy + \begin{pmatrix} dw \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} b_{4_u} + (Q_u dx_u + Q'_{ul} dx_l + Q'_{uf} dx_f) - A'_u dy + dw \\ b_{4_l} + (Q_{ul} dx_u + Q_l dx_l + Q'_{lf} dx_f) - A'_l dy \\ b_{4_f} + (Q_{uf} dx_u + Q_{lf} dx_l + Q_f dx_f) - A'_f dy \end{pmatrix} \\
&\Downarrow
\end{aligned}$$

$$(47) \quad dz_u = b_{4_u} + (Q_u dx_u + Q'_{ul} dx_l + Q'_{uf} dx_f) - A'_u dy + dw$$

$$(48) \quad dz_l = b_{4_l} + (Q_{ul} dx_u + Q_l dx_l + Q'_{lf} dx_f) - A'_l dy$$

$$(49) \quad 0 = b_{4_f} + (Q_{uf} dx_u + Q_{lf} dx_l + Q_f dx_f) - A'_f dy$$

Se puede observar fácilmente que la ecuación (49) se satisface. Para ello basta observar que, usando la definición de Θ en (44), el término $Q_{uf}dx_u + Q_{lf}dx_l + Q_fdx_f$

es igual a las n_f últimas componentes de Θdx . Usando ahora la relación $\Theta dx = A'dy - r$ de (41), directamente se tiene que las últimas n_f componentes de Θdx son igual a $A'_f dy - r_f$, donde $r_f = b_{4_f}$ tal y como fue definido en (45). Por lo tanto

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{?}{=} b_{4_f} + (Q_{uf}dx_u + Q_{lf}dx_l + Q_fdx_f) - A'_f dy \\ &= b_{4_f} + (A'_f dy - r_f) - A'_f dy \\ &= b_{4_f} - r_f \\ &= 0 \end{aligned}$$

Finalmente, la solución del sistema lineal (32) tiene la siguiente expresión:

$$(50) \quad (A\Theta^{-1}A')dy = b_3 + A\Theta^{-1}r$$

$$(51) \quad dx = \Theta^{-1}(A'dy - r)$$

$$(52) \quad dw = F^{-1}(b_2 + Wdx_u)$$

$$(53) \quad dz_u = b_{4_u} + (Q_{ud}dx_u + Q'_{ul}dx_l + Q'_{uf}dx_f) - A'_u dy + dw$$

$$(54) \quad dz_l = b_{4_l} + (Q_{ul}dx_u + Q_{ld}dx_l + Q'_{lf}dx_f) - A'_l dy$$

donde Θ y r se recogen en (44) y (45), respectivamente.

Nota: Una vez calculada la dirección de movimiento, el resto de pasos del algoritmo (cálculo del paso y actualización del nuevo punto) se realiza de forma análoga al caso del problema lineal. Únicamente hay que tener en cuenta que no se debe hacer intervenir las variables libres al calcular la longitud de paso que preserve la no-negatividad de las variables (puesto que por ser libres no tienen esta restricción).

2.6. Notas sobre la solución obtenida

- Si no existiera la matriz Q (se tiene, por tanto, un problema lineal con variables libres), y según la definición (44), se puede observar que en este caso la matriz Θ_l (que representa la matriz Θ para el caso de sólo disponer de variables lineales) vendría dada por:

$$(55) \quad \Theta_l = \begin{pmatrix} Z_u X_u^{-1} + F^{-1}W & \\ & Z_l X_l^{-1} \\ & & 0 \end{pmatrix}$$

y, claramente, no sería invertible. Por lo tanto, el método descrito anteriormente no sería viable para problemas lineales con variables libres. En el caso de problemas

cuadráticos, podrá invertirse la matriz Θ siempre que al sumar Q a la matriz Θ_l anterior se rompa la singularidad. Si Q es simétrica y definida positiva este hecho siempre se garantizará. No hace falta, sin embargo, imponer una condición tan restrictiva. Por ejemplo, una matriz Q diagonal con ceros en las $n_u + n_l$ primeras posiciones diagonales y valores positivos en las n_f últimas posiciones diagonales, también garantizaría la invertibilidad de Θ . Ver en el apartado siguiente una aplicación de una matriz con estas características.

- De nuevo y como en el caso lineal, la operación más costosa es la solución de un sistema simétrico y definido positivo: $(A\Theta^{-1}A')dy = b_3 + A\Theta^{-1}r$. Sin embargo, a diferencia del caso lineal donde Θ era una matriz diagonal, en el caso cuadrático hay que factorizar Θ^{-1} en cada iteración. Y una vez factorizada, utilizar esta factorización para obtener $A\Theta^{-1}A'$ y poder realizar su posterior descomposición de Cholesky. El coste computacional de estas operaciones es elevado. Naturalmente, si la matriz Q fuera diagonal, el coste computacional del sistema anterior sería equivalente al de un problema lineal (ver la siguiente sección). Vanderbei y Carpenter (1993) proponen la solución del ya citado «sistema aumentado» (método implementado en LoQo) en vez del sistema de ecuaciones «normales en forma primal» $(A\Theta^{-1}A')dy = b_3 + A\Theta^{-1}r$.
- Una posible forma de proceder en un problema lineal con variables libres es como sigue, ver Vanderbei y Carpenter (1993). Se observó en (55) que en este caso la matriz Θ_l no era invertible, debido a la no existencia de las holguras duales z_f . Por tanto, se pueden considerar existentes dichas holguras z_f , asociadas con las variables libres x_f . Sin embargo, $z_f = 0$ en el óptimo forzosamente (ya que teóricamente no deberían existir estas holguras duales). Dado que siempre se debe garantizar que $z_{f_i}x_{f_i} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, n_f$, y se pretende que $z_{f_i} = 0$, se debe asegurar que $x_{f_i} \neq 0$. Se obtendrá entonces el paso de las variables primales sin tener en cuenta las variables libres x_f . Si con este paso alguna de las variables libres x_{f_i} pasa a tener un valor cercano a 0 o negativo (inicialmente todas las x_f son positivas), entonces se realiza el cambio de variable $x'_{f_i} = k - x_{f_i}$ donde k es un valor positivo suficientemente alejado de 0 (Vanderbei y Carpenter (1993) proponen $k = 2$) modificando convenientemente la estructura del problema (negar una columna de A y modificar el término de la derecha b). En el nuevo espacio de variables, x'_{f_i} tendrá un valor suficientemente positivo, y la z'_{f_i} asociada deberá valer 0. Este proceso deberá repetirse a lo largo del algoritmo tantas veces como sea necesario.

3. TRANSFORMACIÓN DEL PROBLEMA CUADRÁTICO EN UNO EQUIVALENTE SEPARABLE

El algoritmo descrito en la sección anterior para problemas cuadráticos tiene el inconveniente computacional de tener que factorizar $A\Theta^{-1}A'$ en cada iteración. Si la matriz Θ fuera diagonal (el problema se denomina en este caso «separable») el esfuer-

zo computacional sería equivalente al realizado para problemas lineales. La estrategia a usar consistirá en transformar el problema original en uno equivalente donde la matriz Q sea diagonal. Vanderbei y Carpenter (1993), entre otros, utilizan también esta estrategia para el «sistema aumentado». En cambio, en este trabajo se observará el rendimiento logrado usando la transformación del problema cuando se solucionan las ecuaciones «normales en forma primal».

Sea el siguiente problema cuadrático:

$$(56) \quad \begin{aligned} \min_x \quad & c'x + \frac{1}{2}x'Qx \\ \text{sujeto a} \quad & A_u x_u + A_l x_l = Ax = b \\ & 0 \leq x_u \leq \bar{x}_u \\ & 0 \leq x_l \end{aligned}$$

Factorizando la matriz Q de forma que:

$$(57) \quad Q = LL'$$

la nueva expresión de la función objetivo será:

$$c'x + \frac{1}{2}x'Qx = c'x + \frac{1}{2}x'LL'x = c'x + \frac{1}{2}x'_f x_f \quad \text{donde } x_f = L'x$$

El problema original (56) será:

$$(58) \quad \begin{aligned} \min_x \quad & c'x + \frac{1}{2}x'_f x_f \\ \text{sujeto a} \quad & Ax = b \\ & L'x - x_f = 0 \\ & 0 \leq x_u \leq \bar{x}_u \\ & 0 \leq x_l \\ & x_f \text{ libre} \end{aligned}$$

La matriz del nuevo problema, que será denotada por \tilde{Q} , es ahora:

$$(59) \quad \tilde{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & & \\ & \mathbf{0} & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

donde la matriz identidad corresponde a las variables libres x_f , y los bloques diagonales asociados con x_u y x_l son $\mathbf{0}$. El nuevo problema (58) tiene la ventaja de que la matriz \tilde{Q} es diagonal, lo cual reducirá el esfuerzo computacional. El inconveniente es que tiene n_f nuevas variables y restricciones, donde $n_f = \text{rango}(Q) = \text{rango}(L)$. Sin embargo, si la esparsidad de la matriz L definida en (57) es grande, puede esperarse una mayor rapidez en la resolución del problema equivalente (58) que optimizando directamente el original (56).

Para poder aplicar el algoritmo desarrollado en el apartado anterior, se vió que se debía garantizar que la matriz Θ definida en (44) fuera invertible. Sin embargo, usando la definición (59) de \tilde{Q} se observa que:

$$\begin{aligned}\Theta &= \tilde{Q} + \begin{pmatrix} Z_u X_u^{-1} & & \\ & Z_l X_l^{-1} & \\ & & \mathbf{0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} F^{-1} W & & \\ & \mathbf{0} & \\ & & \mathbf{0} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} Z_u X_u^{-1} + F^{-1} W & & \\ & Z_l X_l^{-1} & \\ & & 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

y, por tanto, claramente es una matriz invertible. Además, dado que las únicas variables libres son las creadas en el proceso de transformación de un problema a otro, y que la submatriz de Θ asociada con estas variables será siempre 1, no es necesario realizar ningún tratamiento específico para variables libres, con el consiguiente ahorro computacional.

4. GENERACIÓN DE PROBLEMAS TESTS CUADRÁTICOS

Para poder verificar el rendimiento computacional de la implementación realizada del algoritmo anterior y su comparación con implementaciones alternativas, se ha desarrollado un generador automático de problemas cuadráticos con Q simétrica y definida positiva. A diferencia del caso lineal, donde existe la batería estándard de problemas Netlib, para el caso cuadrático no se conoce de ninguna colección de problemas simétricos y definidos positivos usados como batería de tests. A pesar de existir ya algunos generadores aleatorios de problemas cuadráticos (como el descrito en Calamai *et al.* (1993)), estos generan problemas con una estructura totalmente aleatoria. Otros autores (como Vanderbei y Carpenter (1993)) han generado problemas cuadráticos a partir de los problemas lineales de la Netlib, obteniendo la matriz Q como $Q = A_r' A_r$, donde A_r representa las $r\%$ primeras filas de la matriz de restricciones lineales A (siendo r un parámetro preestablecido).

En este trabajo se ha optado por una opción intermedia entre las dos anteriores. Por un lado, los problemas cuadráticos serán generados a partir de un problema lineal ya existente (se han usado los problemas Netlib). Así, el problema generado no será totalmente aleatorio y de estructura cualquiera. Sin embargo, si ha sido obtenida aleatoriamente la estructura y coeficientes de la matriz Q , en vez de definirla a partir de la matriz de restricciones lineales A . De hecho, si se usara la técnica antes comentada de definir $Q = A_r' A_r$, claramente al convertir el problema cuadrático en uno equivalente separable, la nueva matriz de restricciones \tilde{A} que aparecería, según (58), vendría dada

por

$$\tilde{A} = \begin{array}{|c|c|} \hline A_r & \mathbf{0} \\ \hline A_r & \mathbf{1} \\ \hline \end{array}$$

Dado que A_r no es más que una submatriz de A , este hecho influiría al construir la matriz $\tilde{A}\tilde{\Theta}\tilde{A}$, la cual estaría formada por submatrices que serían unas subconjunto de las otras (resultando, por tanto, patrones de esparsidad repetidos).

El generador desarrollado, por tanto, genera la matriz Q de forma aleatoria a partir de tres parámetros: p_1 , p_2 y s . El primer parámetro (con rango de 1 a 100) es usado para calcular la dimensión de la matriz Q como $n_q = n \cdot p_1 / 100$, siendo n el número de variables del problema, donde n_q denota la dimensión de Q . Las n_q variables que intervendrán en la parte cuadrática se escogen aleatoriamente de entre las $n_u + n_l$ variables lineales del problema (56). El segundo parámetro (también expresado como un porcentaje) es usado para obtener el número de elementos diferentes de 0 de la parte sobrediagonal de Q (la parte subdiagonal es simétrica y la diagonal siempre tiene un coeficiente diferente de 0). El número de elementos diferentes de 0, denotado por nz_q , viene dado por $nz_q = n_q^2 \cdot p_2 / 100$. La distribución de estos nz_q elementos se hace de forma aleatoria sobre la parte sobrediagonal de Q . Los valores que pueden tomar los coeficientes sobrediagonales de Q se obtienen aleatoriamente de una distribución uniforme $[0, M]$, donde $M = \sum_{i=1}^n c_i / n$, siendo c_i el coste lineal de la variable x_i (por tanto, M es la media del vector de costes lineales c). Para obtener de forma aleatoria el patrón de esparsidad y los coeficientes cuadráticos se utiliza el generador pseudo-aleatorio descrito por Schrage (1979), el cual es alimentado inicialmente con la semilla proporcionada por el tercer parámetro s . Una vez se han obtenido los coeficientes sobrediagonales, se obtienen los términos diagonales Q_{ii} , $i = 1, \dots, n$ aleatoriamente de una distribución uniforme $[\sum_{j=1}^n Q_{ij}, \sum_{j=1}^n Q_{ij} + M]$, garantizando de esta forma que la matriz será diagonal dominante y definida positiva.

Se han utilizado los 80 problemas lineales de la colección Netlib para la obtención de una batería de problemas tests cuadráticos, según la técnica descrita anteriormente. Las características de los problemas lineales Netlib se muestran en la tabla 1 donde m , n y nel son el número de condiciones, variables y elementos no nulos de la matriz de restricciones. Las características de la matriz Q generada en cada caso (dimensión y número de elementos sobrediagonales no nulos) puede inferirse a partir de las definiciones anteriores de n_q y nz_q , de los parámetros p_1 , p_2 y s (concretamente, se han usado en todas las pruebas $p_1 = 5$, $p_2 = 5$ y $s = 3141592$) y del número de variables de cada problema según se recoge en la tabla 1.¹

¹Contactar con el autor para obtener una copia del generador (programado en ANSI-C) en jcastro@etse.urv.es.

Tabla 1. Dimensiones de los problemas Netlib

Problema	<i>m</i>	<i>n</i>	<i>nel</i>
25fv47	822	1571	11127
80bau3b	2263	9799	29063
adlittle	57	97	465
afiro	28	32	88
agg	489	163	2541
agg2	517	302	4515
agg3	517	302	4531
bandm	306	472	2659
beaconfd	174	262	3476
blend	75	83	521
bnl1	644	1175	6129
bnl2	2325	3489	16124
boeing1	351	384	3865
boeing2	167	143	1339
bore3d	234	315	1525
brandy	221	249	2150
czprob	930	3523	14173
d2q06c	2172	5167	35674
d6cube	416	6184	43888
degen2	445	534	4449
degen3	1504	1818	26230
e226	224	282	2767
etamacro	401	688	2489
fffff800	525	854	6235
finnis	498	614	2714
fit1d	25	1026	14430
fit1p	628	1677	10894
fit2d	26	10500	138018
fit2p	3001	13525	60784
ganges	1310	1681	7021
gfrd-pnc	617	1092	3467
greenbea	2393	5405	31499
grow15	301	645	5665
grow22	441	946	8318
grow7	141	301	2633
israel	175	142	2358
kb2	44	41	291
lotfi	154	308	1086
maros	847	1443	10006
maros-r7	3137	9408	151120
nesm	663	2923	13988
pilot	1442	3652	43220
pilot87	2031	4883	73804
pilotnov	976	2172	13129
recipe	92	180	752
sc105	106	103	281
sc205	206	203	552
sc50a	51	48	131
sc50b	51	48	119
scagr25	472	500	2029
scagr7	130	140	553
scf xm1	331	457	2612
scf xm2	661	914	5229
scf xm3	991	1371	7846
scorpion	389	358	1708
scrs8	491	1169	4029
scsd1	78	760	3148
scsd6	148	1350	5666
scsd8	398	2750	11334
sctap1	301	480	2052
sctap2	1091	1880	8124
sctap3	1481	2480	10734
seba	516	1028	4874
share1b	118	225	1182
share2b	97	79	730
shell	537	1775	4900
ship04l	403	2118	8450
ship04s	403	1458	5810
ship08l	779	4283	17085
ship08s	779	2387	9501
ship12l	1152	5427	21597
ship12s	1152	2763	10941
sierra	1228	2036	9252
standata	360	1075	3038
standgub	362	1184	3147
standmps	468	1075	3686
stocfor1	118	111	474
stocfor2	2158	2031	9492
wood1p	245	2594	70216
woodw	1099	8405	37478

Tabla 2. Efectividad de los sistemas IPQ, LoQo y Minos en los problemas cuadráticos

Problema	IPPC		IP		LoQo		Minos 5.3
	niter	t	niter	t	niter	t	t
25fv47	26	31.7	31	57.9	32	135.0	312.5
80bau3b	35	900.7	(a)		146	6675.9	1211.7
adlittle	15	0.1	18	0.5	18	0.6	0.4
afiro	10	0.0	13	0.3	13	0.3	0.1
agg	41	8.4	27	4.2	26	5.2	2.0
agg2	42	15.1	26	15.5	27	21.1	4.1
agg3	36	13.3	24	13.9	24	18.8	3.9
bandm	21	1.7	22	2.8	22	3.7	4.0
beaconfd	14	1.3	17	2.0	18	2.3	1.4
blend	15	0.2	17	0.5	17	0.6	0.4
bnl1	50	18.0	65	28.3	64	147.4	29.8
bnl2	37	244.5	(b)		70	3104.7	424.7
boeing1	34	4.8	43	8.1	41	28.1	9.3
boeing2	23	0.9	32	1.9	22	1.5	1.3
bore3d	21	1.0	21	1.7	23	1.9	1.0
brandy	16	1.0	23	2.8	22	3.1	2.1
czprob	45	35.2	61	24.4	86	52.8	109.4
d2q06c	37	636.4	53	742.2	(b)		4777.0
d6cube	53	316.4	36	247.8	(a)		1058.5
degen2	14	6.1	20	11.8	20	17.6	11.3
degen3	20	170.9	23	197.5	23	233.4	245.2
e226	23	1.6	22	3.1	23	4.4	4.8
etamacro	31	6.6	42	15.6	42	18.3	7.2
fffff800	55	18.1	37	25.9	101	125.5	5.8
finnis	27	3.4	29	4.3	36	9.2	10.1
fit1d	27	4.1	23	8.3	25	8.7	23.3
fit1p	15	237.1	30	8.4	30	25.2	25.6
fit2d	(a)		26	341.8	29	374.3	3921.0
fit2p	(a)		41	142.0	43	698.6	2285.2
ganges	38	21.6	32	18.9	34	41.2	12.4
gfrd-pnc	52	3.9	(b)		(b)		7.5
greenbea	125	832.0	(b)		63	1588.4	1209.0
grow15	21	3.0	28	7.3	31	93.7	15.3
grow22	24	6.4	32	13.1	43	305.4	26.2
grow7	20	1.0	25	2.9	26	12.4	3.7
israel	46	8.8	28	2.4	28	4.2	3.6
kb2	15	0.1	16	0.3	16	0.3	0.2
lotfi	23	0.6	38	1.9	18	3.3	1.5
maros	(b)		45	68.1	76	251.4	96.4
maros-r7	(a)		(a)		29	7981.5	(b)

(a) Memoria insuficiente. (b) Problemas de convergencia.

Tabla 2. (cont.) Efectividad de los sistemas IPQ, LoQo y Minos en los problemas cuadráticos

	IPPC		IP		LoQo		Minos 5.3
nesm	39	47.2	38	40.9	25	193.9	103.9
pilot	46	850.0	51	1049.6	(b)		2886.4
pilot87	50	3312.9	71	6291.6	70	14929.4	8679.1
pilotnov	42	82.1	40	88.7	(b)		317.2
recipe	22	0.3	16	0.7	16	0.8	0.4
sc105	15	0.1	14	0.4	17	0.6	0.3
sc205	16	0.3	53	2.1	20	1.1	0.5
sc50a	13	0.1	15	0.4	15	0.4	0.2
sc50b	12	0.1	18	0.3	18	0.3	0.2
scagr25	28	1.7	41	3.6	43	5.6	6.3
scagr7	19	0.2	20	0.6	20	0.8	0.5
scfxml1	26	2.2	26	3.4	29	6.0	3.2
scfxml2	25	5.7	30	8.1	33	13.8	12.7
scfxml3	33	14.6	35	16.6	38	26.2	24.2
scorpion	15	0.8	25	2.0	27	3.0	1.7
scrs8	25	4.1	34	6.2	34	24.9	8.2
scsd1	18	0.8	17	1.5	18	127.7	1.9
scsd6	16	2.0	18	2.9	26	715.5	4.5
scsd8	18	10.3	23	9.0	25	1083.9	22.2
sctap1	18	1.1	32	2.7	31	10.3	2.4
sctap2	22	18.1	28	16.7	31	325.3	22.0
sctap3	21	34.5	28	22.2	30	479.7	36.3
seba	30	55.2	59	8.3	58	14.2	4.3
share1b	55	0.9	22	1.2	28	1.7	1.1
share2b	13	0.2	22	0.8	23	0.9	0.5
shell	47	6.9	33	5.9	34	27.4	5.1
ship04l	14	5.6	29	7.1	30	21.5	6.2
ship04s	14	2.7	29	4.6	33	9.4	3.6
ship08l	16	26.0	38	22.3	36	72.1	25.9
ship08s	18	8.2	35	10.2	36	18.1	8.8
ship12l	17	50.6	44	41.1	47	114.0	50.6
ship12s	18	12.1	41	15.5	40	21.1	13.2
sierra	42	37.9	48	31.5	55	1989.4	13.2
standata	21	2.7	22	3.5	21	6.2	2.7
standgub	22	3.3	20	3.1	21	7.0	2.9
standmps	29	4.8	23	4.5	23	17.7	4.0
stocfor1	19	0.2	20	0.6	20	0.9	0.3
stocfor2	31	49.4	38	36.8	37	38.2	30.6
wood1p	24	67.5	35	135.1	35	207.0	31.0
woodw	30	465.4	80	359.5	75	7254.9	100.8
Promedio	25	71.7	30	111.9	31	427.9	148.7

(a) Memoria insuficiente. (b) Problemas de convergencia.

5. RESULTADOS COMPUTACIONES PARA LOS PROBLEMAS CUADRÁTICOS

En este apartado se presenta una comparación computacional de la implementación realizada del método presentado en los apartados anteriores, sea IPQ, y los sistemas LoQo y Minos 5.3 (Murtagh y Saunders (1983)). Dado que LoQo permite abordar los problemas cuadráticos tanto directamente en su forma original como a través de la transformación en equivalentes separables, se utilizan ambas alternativas en la comparación. De esta forma se observa si la eficiencia de IPQ respecto a LoQo se debe al hecho de transformar el problema en uno equivalente separable o a la utilización de las «ecuaciones normales en forma primal».

La tabla 2 recoge los resultados obtenidos con los 80 problemas de la colección Netlib presentados en la tabla 1, una vez transformados en problemas cuadráticos mediante el algoritmo descrito en el apartado anterior (usando, tal y como ya se ha indicado, los valores de $p_1 = 5$, $p_2 = 5$ y $s = 3141592$). La tabla recoge el número de iteraciones (niter) y tiempo de computación requerido (t), en segundos de CPU, para IPC y las alternativas de LoQo para el problema original y el problema equivalente separable (denotado por LoQo(sep)), y Minos. Para Minos únicamente se muestra el tiempo total de computación (no tiene sentido comparar su número de iteraciones con el de los métodos de punto interior). No se muestra el valor de función objetivo puesto que para los cuatro códigos se obtuvieron los mismos resultados. Las ejecuciones han sido realizadas sobre una estación de trabajo SunSparc 10/41 de 64 Mbytes de memoria (32 reales y 32 mapeadas en disco) y aproximadamente 10 Mflops. Cuando la ejecución no ha podido ser realizada se indica el motivo: ^(a) indica memoria insuficiente, y ^(b) problemas de convergencia.

Teniendo en cuenta los resultados recogidos en la tabla 2 puede observarse, en primer lugar, que Minos es el sistema más robusto, solucionando 79 de los 80 casos posibles. IPQ resuelve 76 casos. LoQo no pudo ejecutar cinco casos y LoQo(sep) tampoco pudo ejecutar cinco casos.

En lo que se refiere al rendimiento (sólo se tendrán en cuenta los 68 problemas que han podido ser solucionados por los cuatro códigos), se observa como IPQ ha sido el más eficiente en 44 problemas, LoQo en 9 y Minos en 15. LoQo(sep) no tuvo un mejor rendimiento que los otros sistemas en ningún caso. La diferencia de rendimiento entre IPQ y los otros sistemas es especialmente significativa para los problemas de grandes dimensiones (como «pilot87», donde IPQ es mucho más eficiente que LoQo y Minos). También puede observarse cómo en algunos casos las técnicas clásicas de optimización no lineal de gradiente reducido en que se basa Minos son más eficientes que las de punto interior (como, por ejemplo, en los problemas «wood1p» y «woodw»). Hay que tener en cuenta, sin embargo, que IPQ no incluye ningún tratamiento específico para columnas densas (en la versión actual) lo cual repercute negativamente en su

rendimiento (este hecho explica la gran diferencia de rendimiento entre IPQ y los otros sistemas en los problemas fit1p y seba). Añadiendo un tratamiento para este tipo de columnas su eficiencia se vería claramente aumentada.

Otro de los aspectos a destacar es el comportamiento de LoQo y LoQo(sep). En general, LoQo es más eficiente solucionando el problema en su formulación original que una vez transformado. Estos resultados difieren de los obtenidos y presentados en Vanderbei y Carpenter (1993), probablemente debido a la forma en que se construyeron los problemas cuadráticos. Sería necesario, pues, un estudio mucho más amplio con un mayor número de problemas tests (reales y generados) para poder concluir si es mejor transformar el problema o solucionarlo en su forma original. En el método descrito en este trabajo e implementado en IPQ, sin embargo, no hay ninguna duda, puesto que la transformación es prácticamente la única alternativa computacionalmente efectiva.

La última fila de la tabla recoge los promedios de número de iteraciones y tiempo de computación (sólo se han tenido en cuenta los problemas que se resolvieron por los cuatro códigos). Se puede observar que IPQ es el más eficiente. Sin embargo, esta observación está muy influenciada por los resultados del problema «pilot87», y porque algunos de los problemas más costosos («d2q06», «d6cube», «pilot») no han sido contemplados (no fueron solucionados por los cuatro sistemas).

6. CONCLUSIONES

Basados en la experiencia computacional bastante fuerte cuyos resultados principales se han obtenido en el apartado anterior, el método presentado en este trabajo se ha mostrado como una alternativa eficiente al sistema LoQo para la solución de problemas cuadráticos. La diferencia entre ambos enfoques es el hecho de solucionar un sistema simétrico e indefinido («sistema aumentado» en LoQo) o la solución de un sistema simétrico y definido positivo («ecuaciones normales en forma primal» en IPQ). En este último caso se ha mostrado cómo es necesario transformar el problema en un problema equivalente separable. Sin embargo, IPQ es más eficiente en el problema transformado que lo es LoQo en el problema original. A la vista de los resultados obtenidos, también se observa que las técnicas de punto interior para problemas cuadráticos son, en general, una alternativa más eficiente a las técnicas clásicas de programación no lineal de gradiente reducido (sistema Minos entre otros).

7. REFERENCIAS

- [1] **Arbel, A.** (1993). *Exploring Interior-Point Linear Programming. Algorithms and Software*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts.
- [2] **Barnes, E.R.** (1986). «A variation on Karmarkar's algorithm for solving linear programming problems». *Mathematical Programming*, **36**, 174–182.
- [3] **Calamai, P.H., Vicente, L.N. and Júdice, J.J.** (1993). «A new technique for generating quadratic programming test problems», *Mathematical Programming*, **61(2)**, 215–231.
- [4] **Castro, J.** (1995). «Implementació d'un algorisme primal-dual de punt interior amb fites superiors a les variables», *Qüestiió*, **19, 1, 2, 3**, 233–257.
- [5] **Castro, J.** (1998). «Implementación de un algoritmo primal-dual de orden superior mediante el uso de un método predictor-corrector para programación lineal», *Qüestiió*, **22, 1**, 107–120.
- [6] **Duff, I.S., A.M. Erisman y J.K. Reid.** (1986). *Direct Methods for Sparse Matrices*. Oxford University Press, New York.
- [7] **Gay, D.M.** (1985). «Electronic mail distribution of linear programming test problems». *Mathematical Programming Society COAL Newsletter*, **13**, 10–12.
- [8] **George, J.A. y J.W.H. Liu** (1981). *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite Systems*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, USA.
- [9] **Gill, P.E., W. Murray y M.H. Wright** (1981). *Practical Optimization*. Academic Press, London, UK.
- [10] **Karmarkar, N.K.** (1984). «A new polynomial time algorithm for linear programming». *Combinatorica*, **4**, 373–395.
- [11] **Khachiyan, G.** (1979). «A polynomial algorithm in linear programming». *Doklady Akademii Nauk SSSR*, **244(S)**, 1093–1096, traduit en *Soviet Mathematics Doklady*, **20(1)**, 191–194.
- [12] **Kranich, E.** (1991). «Interior point methods for mathematical programming: a bibliography». *Diskussionbeitrag*, Nr. **171**, Dept. of Mathematics, Universität Wuppertal, Germany.
- [13] **Lustig, I.J., R.E Marsten and D.F. Shanno** (1992). «On implementing Mehrotra's predictor-corrector interior-point method for linear programming», *SIAM Journal on Optimization*, **2(3)**, (1992), 435–449.
- [14] **Mehrotra, S.** (1990). «On the implementation of a (primal-dual) interior point method», *Technical Report*, **90-03**. Dept. of Industrial Engineering and Management Science, Northwestern University, Evanston, IL.

- [15] **Monma, C.L y A.J Morton** (1987). «Computational experience with a dual affine variant of Karmarkar's method for linear programming». *Operations Research Letters*, **6**, 261–267.
- [16] **Monteiro, R.D.C y I. Adler** (1989). «Interior path following primal-dual algorithms. Part I: linear programming». *Mathematical Programming*, **44**, 27–41.
- [17] **Monteiro, R.D.C. and Adler, I.** (1989). «Interior path following primal-dual algorithms. Part II: quadratic programming», *Mathematical Programming*, **44**, (1989) 43–66.
- [18] **Murtagh, B.A. y M.A. Saunders** (1983). «MINOS 5.0. User's guide». Dept. of Operations Research, Stanford University, CA, USA.
- [19] **Schrage, L.** (1979). «A More Portable FORTRAN Random Number Generator», *ACM Transactions on Mathematical Software*, June.
- [20] **Terlaky, T.** (1996). (ed.) «Interior Point Methods of Mathematical Programming», Kluwer Academic Publishers, The Netherlands.
- [21] **Vanderbei, R.J.** (1992). «LOQO User's Manual». Princeton University, Princeton, NJ, USA.
- [22] **Vanderbei, R.J.** (1994). «An interior point code for quadratic programming». Princeton University, Princeton, NJ, USA.
- [23] **Vanderbei, R.J.** (1996). *Linear Programming: Foundations and Extensions*. Kluwer Academic Publishers, Boston.
- [24] **Vanderbei, R.J. y T.J. Carpenter** (1993). «Symmetric indefinite systems for interior point methods». *Mathematical Programming*, **58**, 1-32.
- [25] **Vanderbei, R.J., M.S. Meketon y B.A. Freedman** (1986). «A modification of Karmarkar's linear programming algorithm». *Algorithmica*, **1**, 395–407.
- [26] **Wright, M.H.** (1991). «Interior methods for constrained optimization». *Acta Numerica*, 341–407.

ENGLISH SUMMARY

AN INTERIOR-POINT ALGORITHM FOR QUADRATIC PROGRAMMING THROUGH SEPARABLE EQUIVALENT PROBLEMS*

J. CASTRO*

Universitat Rovira i Virgili

This paper presents an interior point algorithm for the solution of symmetric and positive definite quadratic programming problems. Instead of solving the original problem, the algorithm transforms it into an equivalent separable one, thus having a diagonal quadratic coefficients matrix. The main differences between this algorithm and others, like that implemented in the LoQo package, is that it solves the «normal equations in primal form» instead of the «augmented system», and that it does not require an explicit treatment for the quadratic free variables, i.e. those created when obtaining the separable equivalent problem. This algorithm is implemented in the IPQ package, and its efficiency is compared with that of the LoQo and Minos 5.3 packages. The comparison is performed through the solution of 80 problems of the Netlib collection (a standard suite for linear programming). The quadratic problems are generated from the linear ones through an ad-hoc generator for quadratic programming. Though it has been stated in the literature that solving the «augmented system» can be more efficient than solving the «normal equations in primal form» the computational results presented show that IPQ is competitive against LoQo and Minos 5.3, specially in some of the largest instances.

Keywords: Interior point methods, predictor-corrector method, primal-dual algorithm, quadratic programming.

*This work has been supported by Iberdrola grant 95-005 and by CICYT project TAP96-1044-J02-93.

*J. Castro. Estadística i Investigació Operativa. Dept. d'Enginyeria Química. Universitat Rovira i Virgili. Autovia de Salou, s/n. 43006 Tarragona.

-Received November 1996.

-Accepted July 1997.

This paper presents a variation of the primal-dual algorithm for quadratic problems. The main features of the algorithm are as follows:

- i) it considers a partition of the set of variables depending on they are just lower bounded, lower and upper bounded, and free variables (free variables are only allowed to be quadratic ones); leading us to the solution of the following linear programming problem

$$(P) \quad \begin{array}{ll} \min_x & c'x + \frac{1}{2}x'Qx \\ \text{subject to} & A_u x_u + A_l x_l + A_f x_f = b \\ & \underline{0} \leq x_u \leq \bar{x}_u \\ & \underline{0} \leq x_l \\ & x_f \text{ libre} \end{array}$$

- ii) it is not required an explicit treatment for the free quadratic variables.
- iii) the algorithm solves the commonly called «normal equations in primal form», instead of the «augmented system».

In this last point the algorithm presented differs substantially from other quadratic interior point solvers, like LoQo, which solves the «augmented system». Though it has been stated in the literature that solving the indefinite symmetric augmented system can be more efficient than solving the positive definite primal normal equations, the computational results presented in the paper show that an accurate implementation based on the last technique can outperform a solver based on the augmented system.

The algorithm presented solves at each iteration the following «normal equations system»

$$(A\Theta^{-1}A')dy = \tilde{b}$$

where matrix Θ is defined as follows

$$\Theta = (Q + \tilde{Z}X^{-1} + \tilde{F}^{-1}\tilde{W}) = \begin{pmatrix} Q_u + Z_u X_u^{-1} + F^{-1}W & Q'_{ul} & Q'_{uf} \\ Q_{ul} & Q_l + Z_l X_l^{-1} & Q'_{lf} \\ Q_{uf} & Q_{lf} & Q_f \end{pmatrix}$$

Q being the quadratic coefficients matrix. The computational cost of the above system is prohibitive for non-diagonal Q matrices. Therefore, instead of attempting the solution of the original problem, the algorithm transforms it to a separable equivalent one with a diagonal \tilde{Q} matrix. This increases the number of variables and constraints, but reduces considerably the cost of the «normal equations in primal form» system to be solved at each iteration of the algorithm.

The structure of the paper is as follows. The first section of the document presents a brief overview of the state of the art, and outlines the main differences between

the algorithm presented and that implemented in the LoQo package (as stated in the former paragraph).

The second section fully details the algorithm presented for solving quadratic programming problems. The process of reduction of the Karush-Kuhn-Tucker necessary optimality conditions to the positive definite primal normal equations is showed, and the main characteristics of the system $(A\Theta A')dy = b_3 + A\Theta^{-1}r$ obtained are commented. It is also shown that the solution of the previous system is computationally prohibitive if the matrix Θ is not a diagonal one. This forces us to transform the original problem into another equivalent and separable, where the matrix Θ satisfies the property of being diagonal. This is presented in section three.

Last two sections focuses on the computational experiments. In section four the quadratic problems generator employed in the work is detailed. It creates a quadratic problem from a linear one, adding a positive definite matrix Q to the objective function. Section five reports the computational results obtained, comparing the implementation developed (named IPQ) with LoQo, and Minos5.3 over a battery test of 80 problems. Looking at the results, it can be concluded that IPQ is more efficient than the other codes, specially when the dimension of the quadratic problem tends to be large.

Estadística Oficial

THE POST RANDOMISATION METHOD FOR PROTECTING MICRODATA

JOSÉ GOUWELEEuw

PETER KOOIMAN

LEON WILLENBORG

PETER-PAUL DE WOLF

Statistics Netherlands

This paper describes the Post Randomisation Method (PRAM) as a method for disclosure protection of microdata. Applying PRAM means that for each record in the data file according to a specified probability mechanism the score on a number of variables is changed. Since this probability mechanism is known, the characteristics of the latent true data can unbiasedly be estimated from the observed data moments in the perturbed file.

PRAM is applied to categorical variables. It is shown that both cross-tabulation and standard multivariate analysis techniques can easily be adapted to account for PRAM. It only requires pre-multiplication by the transpose of the inverted Markov transition matrix, specifying the randomisation process. Also, estimates for the additional variance introduced by PRAM are given. By a proper choice of the transition probabilities, PRAM can be applied in such a way that certain chosen marginal distributions in the original data file are left invariant in expectation. In that case the perturbed data can be used as if it were the original data. We describe how to obtain such an invariant PRAM process. Finally, some consequences of using PRAM in practice are discussed. The present paper is a shortened version of Kooiman et al. (1997).

Keywords: Post RAndomisation Method (PRAM), disclosure, randomised response, Markov matrix, invariant matrix, perturbed data, data swapping.

*José Gouweleeuw, Peter Kooiman, Leon Willenborg and Peter-Paul de Wolf. Statistics Netherlands.
Division Research and Development. Department of Statistical Methods. The Netherlands.

-Received July 1997.

-Accepted October 1997.

1. INTRODUCTION

This paper investigates a suggestion by Särndal *et al.* (1992), pp. 572-3, to protect microdata files against disclosure by randomisation of individual record data, using the methodology of randomised response techniques due to Warner (1965). This methodology is employed when interviewers have to deal with highly sensitive questions, on which the respondent is not likely to report true values in a face-to-face interview setting. By embedding the question in a pure chance experiment the true value of the respondent is never revealed to the interviewer. By knowing the probabilities involved in the chance experiment, the analyst can nevertheless make inferences about the population frequencies of the characteristic investigated, be it with some loss in precision. The suggestion of Särndal *et al.* amounts to applying the same randomisation technique to reported individual scores, prior to their release as microdata files. Thus, true individual scores will not be revealed, whereas an analyst, by taking the (known) randomisation model into account, can still make valid inferences from the data set as a whole.

The methodology advocated in this paper represents an alternative to data swapping as a technique for disclosure protection of microdata (see Dalenius and Reiss, 1982). In data swapping individual scores on certain variables are interchanged between records in such a way that second order moments are kept more or less intact (first order moments are unchanged automatically).

In this paper we take another approach. We no longer require the perturbed file to mimic the original one. Instead we require that data moments of the original file can unbiasedly be estimated from the perturbed file. This is achieved as follows. For each record in the original microdata file, the score on one or more variables is replaced by an other score according to some probability mechanism. Because of this the moments of the data will change, the true data moments of the original file become latent. Since the probability mechanism that is used for perturbing the scores is completely known to the data protector, it can be shipped to the analyst jointly with the perturbed file. This allows the analyst to reconstruct the latent true data moments to the extent that these moments can unbiasedly be estimated from the observed data moments in the perturbed file. This method for disclosure protection of microdata will be called the Post Randomisation Method (PRAM).

In order to make valid inferences from the perturbed file the analyst has to account for the fact that the true data patterns are hidden behind a veil of errors deliberately introduced to protect the individual records. Thus, he has to apply somewhat more complicated types of statistical analyses, which is a drawback of the method in comparison with other disclosure control techniques as for example recoding or suppression of values. However, in this paper we show that this drawback is minor when PRAM is applied to categorical variables. Most disclosure protection analysis

of microdata involves categorical variables. Due to the fact that the analyst knows the complete distribution of the errors, simple corrections that can be routinely applied using standard statistical software are sufficient. As compared to data swapping, the method has the important advantage that it is soundly statistical, not mechanical. This allows us to invoke the complete apparatus of statistical modelling and inference, both to make probability statements about disclosure risks at the individual record level and to calculate the loss in precision of aggregate statistics, due to PRAM.

The remainder of this paper is organised as follows. In Section 2, PRAM is introduced by an example. In Section 3, the technique is worked out for the most elementary type of analysis: cross-tabulation of categorical variables. The probability mechanism used for PRAM can be chosen in such a way that the distribution of the variables in the perturbed file equals that in the original file, in which case the perturbed file can be used directly for analysis. Section 4 describes how to construct such a probability mechanism. In Section 5 the consequences of using PRAM in practice are discussed and finally Section 6 contains some conclusions and topics for further research.

2. DISCLOSURE PROTECTION BY RANDOMISATION

Consider a $\{0, 1\}$ -variable, e.g. gender with $0 = \text{male}$, $1 = \text{female}$. Scores are randomised, independently for each record, by using the following (known) probability matrix $P_x = \{p_{kl}\}$:

$$P_x = \begin{pmatrix} \theta_0 & 1 - \theta_0 \\ 1 - \theta_1 & \theta_1 \end{pmatrix},$$

where p_{kl} represents the probability that the reported randomised score equals l given that the latent true score equals k . In the sequel we denote the true score with ξ , and the randomised score with x . Assume that a data file representing a simple random sample of n records is available. We want to estimate the true population fractions of both categories. From the original file this would be achieved by calculating $T\xi/n$, $T\xi$ being the total of ξ in the data file. From the perturbed file we can similarly calculate T_x . The relation between both totals can be computed as:

$$E(T_x|\xi) = T_\xi \theta_1 + (n - T_\xi)(1 - \theta_0),$$

where $E(\cdot|\cdot)$ denotes the conditional expectation. An unbiased estimator for T_ξ is directly obtained as

$$(2.1) \quad \hat{T}_\xi = \frac{T_x - n(1 - \theta_0)}{\theta_1 + \theta_0 - 1}.$$

Clearly

$$(2.2) \quad V(\hat{T}_\xi | \xi) = \frac{V(T_x | \xi)}{(\theta_1 + \theta_0 - 1)^2},$$

where $V(\cdot | \cdot)$ indicates the conditional variance. Note that we have to assume that $\theta_1 \neq 1 - \theta_0$, since otherwise the denominator in (2.1) as well as (2.2) becomes 0. In practice, it is desirable that θ_1 is not too close to $1 - \theta_0$, since a value of θ_1 close to $1 - \theta_0$ would lead to a large variance as can be seen from formula (2.2).

Formula (2.2) can be rewritten as follows. Note that $T_x | \xi$ is distributed as the sum of two independent binomially distributed random variables with parameters (T_ξ, θ_1) and $(n - T_\xi, \theta_0)$ respectively. Consequently $V(T_x | \xi) = T_\xi \theta_1(1 - \theta_1) + (n - T_\xi)\theta_0(1 - \theta_0)$, so that

$$V(\hat{T}_\xi | \xi) = \frac{T_\xi \theta_1(1 - \theta_1) + (n - T_\xi)\theta_0(1 - \theta_0)}{(\theta_1 + \theta_0 - 1)^2},$$

which for $\theta_0 = \theta_1 (= \theta)$ reduces to

$$V(\hat{T}_\xi | \xi) = \frac{n\theta(1 - \theta)}{(2\theta - 1)^2}.$$

This demonstrates that under the assumptions stated the standard deviation does not depend on the true proportion T_ξ/n . Consequently the coefficient of variation $V(\hat{T}_\xi | \xi)^{1/2}/T_\xi$ is inversely proportional with T_ξ . Thus, the distortion is relatively large when the true score T_ξ (or $n - T_\xi$) is (very) low. This fits nicely into our general purpose to protect rare scores, since these are the most vulnerable to disclosure.

We conclude this section with an example indicating the effect of PRAM on protecting the individual scores. Consider a microdata file of n records, representing a simple random sample of a population of size N . The data set contains exactly one *surgeon*, whose gender is given as *female*. PRAM has been applied to the gender variable, though. Independently for each record, the gender score has been kept intact with probability 0.9, and has been changed to the opposite score with probability 0.1. Other variables in the file are not perturbed. Suppose an intruder knows that the population contains 1 female surgeon and 99 male surgeons. He can derive that the (posterior) odds are 11:1 in favour of a perturbed male surgeon in the data file. When the population contains 9 male surgeons besides the one female surgeon, the odds are 1:1. So without additional information, the intruder can not conclude that he has identified the female surgeon.

3. CROSS-TABULATION

We now turn to the problem of deriving *valid* cross-tabulations from a perturbed data file with categorical variables. The example of Section 2, which refers to the simplest non-trivial tabulation possible, i.e. a (2×1) table, will be generalised step by step. First consider a categorical variable ξ , with categories $\xi^{(k)}$, $k = 1, \dots, K$. To protect a data file containing ξ , we perturb the scores $\xi^{(k)}$. In particular, $\xi^{(k)}$ is transformed into a score $x^{(k)} = \xi^{(l)}$ with probability p_{kl} , for $k, l = 1, \dots, K$. The matrix $P_x = \{p_{kl}\}$ is a Markov matrix, i.e. $P_x \mathbf{1} = \mathbf{1}$, $\mathbf{1}$ being a $(K \times 1)$ vector of ones. Since in practical situations we only want to change a small minority of the true values the diagonal elements of P_x dominate strongly (these will in general be in the range of 0.9 – 1.0), so that P_x certainly has full rank. Now let T_ξ be the $(K \times 1)$ vector of frequencies of the K categories of ξ , observed in the original data file, and similarly, let T_x be the vector of frequencies in the perturbed file. It is easy to verify that

$$(3.1) \quad E(T_x|\xi) = P_x^T T_\xi,$$

where the superscript ' T' ' indicates transposition.

Thus T_ξ can unbiasedly be estimated by

$$\hat{T}_\xi = (P_x^{-1})^T T_x.$$

Note that the matrix P_x has to be non-singular in order for \hat{T}_ξ to be well defined. This implies that the matrix P_x can not contain two equal rows, which means that each value of ξ corresponds uniquely with a distribution of the perturbed variable over the categories, as determined by the rows of P_x . The conditional variance of \hat{T}_ξ is given by

$$V(\hat{T}_\xi|\xi) = (P_x^{-1})^T V(T_x|\xi) P_x^{-1}.$$

Due to the recordwise independence of the multinomial transition process we obtain the covariance matrix of T_x as

$$V(T_x|\xi) = \sum_{k=1}^K T_\xi(k) V_k,$$

where, for $k = 1, \dots, K$, V_k is the $(K \times K)$ covariance matrix of the outcomes $x^{(l)}$, $l = 1, \dots, K$, of the multinomial transition process of an element with true score $\xi^{(k)}$:

$$(3.2) \quad V_k(l, j) = \begin{cases} P_{x,kl} (1 - P_{x,kl}) & \text{if } l = j \\ -P_{x,kl} P_{x,kj} & \text{if } l \neq j \end{cases}, \quad \text{for } l, j = 1, \dots, K.$$

Substituting the estimator \hat{T}_ξ for the unknown true frequencies T_ξ we obtain an estimator for the uncertainty introduced by the noise process:

$$(3.3) \quad \hat{V}(T_x|\xi) = \sum_{k=1}^K \hat{T}_\xi(k) V_k.$$

The derivations show that univariate frequencies can straightforwardly be corrected for the noise added to the file. It just requires pre-multiplication with the transpose of the inverted transition probability matrix. This matrix can be supplied with the (perturbed) data file so that analysis only requires a matrix multiplication as an extra step in the tabulation. Using the same information it is also possible to estimate covariances of the estimated true frequencies. This result generalises to multivariate distributions (see Kooiman *et al.*, 1997).

A problem related to cross-tabulation that is of practical importance is the following. Some users of statistical microdata sets want to match extra variables to the data set supplied. We give a simplified example. Suppose the data set supplied to a client contains the dichotomous variable car *ownership* C (0: does not possess a car; 1: does possess a car) and the highly detailed geographical classification indicating *place of living* G (say, 1000 localities). The client wants to analyse the relationship between car ownership and the presence of a railway station in the place of living. For each of the 1000 localities of the geographical classification the client knows whether there is a railway station or not. When the file is not perturbed it is easy to match this data to the file and add a third *variable railway station* R (0: has no direct access to railway facilities; 1: does have direct access to railway facilities). Then, the analysis could be done by studying the 2×2 cross classification of the variables C and R. The variable G is only used as an intermediate variable; it does not play a role in the subsequent analysis.

The question arises whether this process, which occurs frequently in practice, is still feasible when the microdata file supplied to the client has been perturbed. The answer is: yes, it is still possible, but not by matching the new variable to the (perturbed) microdata file itself. What can be done is the following. First estimate the (2×1000) table T_{CG} . Then an unbiased estimate of the true table is

$$\hat{T}_{CR} = (P_C^{-1})^T \tilde{T}_{CG} P_G^{-1} T_{GR},$$

where $\hat{T}_{CG} = (P_C^{-1})^T \tilde{T}_{CG} P_G^{-1}$ is the estimated $C \times G$ table.

In fact the T_{GR} table acts as an aggregator of the rows of T_{CG} . The process of matching additional variables as indicated above, therefore amounts to the addition of specific aggregation keys for detailed classificatory variables present in the data set. A similar example is occupation, which could for instance be aggregated according to the distinction between white collar and blue collar work.

So far we have demonstrated that tabular analysis of perturbed microdata sets consisting of categorical variables poses no fundamental problems. The frequency tables summarise all available information in the data set. Multivariate analysis for categorical data, like loglinear modelling or correspondence analysis, can therefore proceed from the estimates of the latent true tables. The presence of a small bit of extra va-

riance in these estimates will generally pose no problems to the analyst, as the extra variance just adds to the sampling variance that is present in the data anyhow.

A somewhat more serious problem might be that for small frequencies in the original table the estimated frequencies can turn out to be negative. Indeed, when a true frequency is zero and its estimate is unbiased, positive and negative estimates are equally likely to occur. When the analyst is interested in the cross-tabulation per se, he might truncate estimated frequencies at zero: although a biased estimate results, the mean squared error of the cells involved decreases by the truncation. However, this procedure introduces an upward bias in the row and column totals associated with these cells.

A final problem is that subdomain analysis can not proceed as usual, as subdomains can no longer be properly identified when the domain indicator involved has been affected by PRAM. The solution is simple, though. We add the domain indicator to the set of variables under analysis, and (re)construct the relevant tables, including the domain indicator as an extra variable in the tabulations. The table entries pertaining to the subdomain of interest give unbiased estimates of the original subdomain tabulations.

4. INVARIANT PRAM

So far, it was seen that applying PRAM implies that the perturbed tables have to be pre-multiplied by $(P_x^{-1})'$. In this section, it will be demonstrated that the analysis of the perturbed data file can be simplified if P_x is chosen to be invariant with respect to the distribution of the variable that is to be perturbed. Here distribution can refer to the distribution in the data file (the sample) as well as the distribution in the population. The consequence of this choice of P_x will be discussed in this section.

First consider the case where the data file contains one categorical variable ξ with categories $\xi^{(k)}$, $k = 1, \dots, K$. As before, $\xi^{(k)}$ is transformed into a score $x^{(k)} = \xi^{(l)}$ with probability p_{kl} for $k, l = 1, \dots, K$. The matrix $P_x = \{p_{kl}\}$ now should be chosen in such a way that the distribution of ξ over the different categories in the original data file is invariant with respect to P_x , i.e. P_x should satisfy .

$$(4.1) \quad P_x^T T_\xi = T_\xi.$$

The $K \times K$ identity matrix I always satisfies this equation, but this is not very interesting, since the perturbed data file will be the same as the unperturbed data file. In general, there will be at least one other solution P_x for this set of equations (since there are $K(K - 1)$ unknowns and K equations). For example, P_x can be chosen as follows. Assume without loss of generality that the categories are ordered in such a

way that $T_\xi(k) \geq T_\xi(K) > 0$ for $k = 1, \dots, K$

$$(4.2) \quad p_{kl} = \begin{cases} 1 - (0.1 T_\xi(K)/T_\xi(k)) & \text{if } l = k \\ 0.1 T_\xi(K)/T_\xi(k) & \text{if } l = (k+1) \bmod K \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

Then a simple computation shows that this matrix P_x satisfies

$$P_x^T \mathbf{1} = \mathbf{1} \quad \text{and} \quad P_x^T T_\xi = T_\xi.$$

There are other choices of P_x possible.

Now suppose that P_x is chosen such that (4.1) is satisfied. In that case

$$E(T_x | \xi) = P_x^T T_\xi = T_\xi.$$

Here the first equality follows from formula (3.1) and the second equality follows from the choice of P_x . This means that T_ξ can unbiasedly be estimated by

$$\hat{T}_\xi = T_x.$$

Note that a transformation satisfying (4.1) is indeed invariant with respect to the (sample) distribution of ξ . However this invariance does not entail that the transformation is invariant with respect to crossings of ξ with other variables in the file.

5. APPLICATION OF PRAM

Now that we have introduced PRAM, the question that remains to be considered is how to apply this technique in practice. This essentially means that a choice should be made for the Markov matrices to be applied. This involves several aspects that are discussed in separate subsections.

5.1. Markov Matrix Classes

For practical purposes it is important to study a few special classes of Markov matrices that might be considered for use in PRAM. Below we study three types of such matrices. Other choices are also possible, however. What type of Markov matrix to choose for a variable or set of variables in a particular application of PRAM depends on such things as the initial distribution to be left invariant (if any) and requirements implied by the acceptability of certain combinations of values (only if combinations

of variables have to be considered in the light of integrity checks). In fact it takes some further study into the structure of these matrices so as to inform the practitioner who wants to make a motivated choice among the various possibilities.

5.1.1. Type I: two different non-zero values per row

Suppose that the number of categories for a variable on which PRAM is applied, is K . A type I Markov matrix P is one that has nonzero values on the main diagonal and for each row there is at least one other nonzero entry. Nonzero entries outside the main diagonal are all the same within a row (they may differ among rows) and they will in general not be equal to the entry on the diagonal in the same row. In fact if in row i there are $k_i - 1$ nonzero off-diagonal elements, they are all equal to $(1 - p_{ii})/(k_i - 1)$, where p_{ii} is the i -th diagonal element. Furthermore we require that P is non-singular, so that the inverse of P exists. Note that each row in P has two unknowns, implying that, because the row entries should add to 1, there are K unknowns. Note that the matrix that is defined in formula (4.2) is a type I matrix. In this case $k_i = 2$ for all i .

Special cases of Type I matrices are given in (5.1) below. In both cases k_i does not depend on i . In the first case $k_i = 2$, and in the second case $k_i = K$.

(4.3)

$$\begin{pmatrix} p_1 & \bar{p}_1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & p_2 & \bar{p}_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & p_{k-1} & \bar{p}_{k-1} \\ \bar{p}_k & 0 & \dots & \dots & 0 & p_k \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} p_1 & \tilde{p}_1 & \dots & \dots & \tilde{p}_1 \\ \tilde{p}_2 & p_2 & \tilde{p}_2 & \dots & \tilde{p}_2 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \tilde{p}_{k-1} & \dots & \tilde{p}_{k-1} & p_{k-1} & \tilde{p}_{k-1} \\ \tilde{p}_k & \dots & \dots & \tilde{p}_k & p_k \end{pmatrix}$$

where $\bar{p}_i = (1 - p_i)$, in the first matrix, and $\tilde{p}_i = (1 - p_i)/(K - 1)$ in the second matrix, for $i = 1, \dots, K$.

5.1.2. Type II: more than two different non-zero values per row

In this case we assume well-defined functional relationships between diagonal elements and the nonzero off-diagonal elements in the same row as the respective diagonal element. In this light the Type I matrices are a subclass of the Type II matrices: each off-diagonal element is a linear function of the corresponding diagonal element, and besides these linear relationships are the same for the off-diagonal elements in the same row. This removes the tight constraint for the Type I Markov matrices namely that of the equality of the nonzero off-diagonal elements in the same row.

5.1.3. Block matrices

This is not a new type in the sense of the previous two cases, but rather a type that can be used with the blocks of e.g. Type I or of Type II. A block matrix has blocks P_j on the diagonal and all off-diagonal blocks have only zero entries. A block matrix can be used in case the vector of probabilities to be left invariant can be split into two or more parts that can, or should, be considered independent from each other. A motivation for this could be derived from the values in the probability vector to be left invariant. It might be more attractive to group these value into blocks consisting of categories for whom the associated probabilities of the probability vector to remain invariant are (almost) equal.

5.2. Disclosure Risk

We discuss the disclosure risk criterion that can be used to judge the effectiveness of a PRAM procedure. The idea behind the risk measure that we propose is based on the paradigm used by Statistics Netherlands (see Willenborg and De Waal, 1996). Suppose that we consider a particular combination of key values in a record in the perturbed file, given the PRAM techniques that have been applied to the variables whose values are considered in the combination. For this combination the set of original values that could yield it can be determined, as well as their probabilities. In fact, we may consider the combination observed in the perturbed file equivalent to the set of original combinations, together with their probabilities. To judge whether this set of combinations is safe we apply a reasoning borrowed from the case of data without measurement errors. In that case one can apply the principle that the frequency of a particular combination in the population is used to decide about the safety or unsafety of that combination. If the combination occurs more frequently than a threshold value it is considered safe, otherwise it is considered unsafe.

Instead of considering the expected frequency of the observed scores, the effectiveness of PRAM can also be judged by considering the posterior odds, as was done in the example at the end of Section 2. With posterior odds, we mean the (relative) probability that a rare score in the perturbed file corresponds with a rare score in the original file. These posterior odds should be small, so as to confuse a potential intruder. How small these odds have to be, is a topic of further research.

5.3. Information Loss

In this subsection we consider a method to quantify the information loss due to the application of PRAM. A straightforward measure is the increase of variance of the estimates due to the measurement error introduced by PRAM. Appropriate variance formulas have been derived in Sections 3 and 4. Another approach that could be used

for this purpose is by considering the concept of entropy, as introduced by Shannon in communication theory in the 1940's (see Shannon and Weaver, 1949). In information theory it is assumed that a message is to be transmitted across a noisy channel, that is a communication channel that may perturb part of the message. As a result of the noisiness of the channel the message received at the other end of the channel may be distorted. The problem then is to restore the original message from the received message.

We can use the paradigm of the noisy channel through which a message is sent, to calculate the information loss in case of the application of disclosure control techniques such as PRAM¹. It is a reasonable approach to produce a safe microdata file from an unsafe one by applying disclosure control techniques in such a way to the original microdata set that the resulting file is safe (according to the criteria applied) while the amount of information loss due to the modification is minimised.

6. CONCLUDING REMARKS

In this paper, PRAM was introduced for categorical variables. It was shown how cross-tabulations for the unperturbed variables could be unbiasedly estimated from the perturbed file and how the additional variance introduced by the PRAM process could be estimated. Furthermore, it was shown that the analysis could be simplified if an invariant matrix P_x was used for PRAM. However it remains to be studied whether it is possible to choose P_x in such a way that all cross-tabulations are (nearly) preserved. A difficulty with the PRAM method is the preservation of consistency in the data. Inconsistent data are undesirable for statistical purposes. Moreover inconsistencies in the data might give a potential intruder a clue about the values that have possibly been perturbed in a record. This knowledge might help such a person to (partly) undo the protective effect of PRAM applied to a microdata file.

A number of topics remain for further research. For instance it should be clear what Markov matrices should be used to apply PRAM: how should the entries be chosen, especially in the case where P_x is invariant with respect to the distribution of some variables: if a block matrix is used, how should the blocks be constructed. This issue is, of course, directly related to the degree of safety that one tries to achieve with a particular PRAM method applied to a microdata file, and also with the information loss that one is willing to accept.

¹The information theory description is mainly colourful imagery. One can just as well assume that the measurement error is specified so that the observed measurements can be used to estimate the underlying, latent values. Contrary to the usual situation encountered when dealing with measurement errors in statistics, the error process in PRAM is exactly known.

Furthermore it remains to be studied what is more convenient in practice: general PRAM or invariant PRAM. The first method is easier for the data protector to apply but it requires extra work on the part of the user, whereas for the second method things are reversed. It is also possible to use a mixture of these two: a matrix which is invariant for a number of combinations in the perturbed data file, but not for all. Some cross-tabulations can then directly be derived from the perturbed data file, and for some a matrix multiplication has to be performed. In that case it is not possible to reconstruct the original microdata file from P_x .

An important topic for further research is to check which standard statistical analysis techniques survive PRAM, and how these techniques could be modified to account for the PRAM process. Techniques that can be framed in terms of second moments of the data, like regression analysis, can easily be adapted to yield consistent estimation results. However, many more statistical techniques still have to be considered.

REFERENCES

- [1] **Dalenius, T.** and **S.P. Reiss** (1982). «Data-swapping: a technique for disclosure control». *Journal of statistical planning and inference*, **6**, 73–85.
- [2] **Kooiman, P., L. Willenborg** and **J. Gouweleeuw** (1997). *PRAM: a method for disclosure limitation of microdata*. Report. Department of Statistical Methods, Statistics Netherlands, Voorburg.
- [3] **Särndal, C.E., B. Swensson** and **J. Wretman** (1992). *Model assisted survey sampling*. Springer, New York.
- [4] **Shannon, C.E.** and **W. Weaver** (1949). *The Mathematical theory of communication*. University of Illinois Press, Urbana.
- [5] **Warner, S.L.** (1965). «Randomized Response: a survey technique for eliminating evasive answer bias», *Journal of the American Statistical Association*, **57**, 622–627.
- [6] **Willenborg, L.** and **T. De Waal** (1996). *Statistical Disclosure Control in Practice*. Springer, New York.

THE ANALYSIS OF SEASONALITY IN ECONOMIC STATISTICS: A SURVEY OF RECENT DEVELOPMENTS*

CHRISTOPHE PLANAS

Eurostat

This article describes the EUROSTAT activities in the field of seasonal adjustment and trend extraction in economic time series. They follow a working program which has been set up during 1995. The attention focuses on X12-REGARIMA (X12 in short), a last update of the X11-family from the Bureau of the Census (see Findley and al., 1996), and on SEATS-TRAMO (see Gomez and Maravall, 1996) which implements the ARIMA-model-based approach to decompose time series. Three main directions are currently followed: evaluation and comparison of these two methods, construction of a software embodying and interfacing X12 and SEATS-TRAMO, and training in applied time series analysis. The preliminary results which have been obtained on the difficult task of comparing both methods are discussed and the design of the software in construction is presented.

Keywords: Seasonal adjustment, signal extraction, X-11, unobserved components, ARIMA Models, Wiener-Kolmogorov filter.

*This paper was written within the framework of a study on Seasonal Adjustment methods, on request of EUROSTAT (contract nr. 6663002). The ideas expressed here are the author's and do not necessarily reflect the position of EUROSTAT. The author thanks Raoul Depoutot and the members of Eurostat's internal task-force on Seasonal Adjustment for their remarks and suggestions.

-Received May 1997.

-Accepted November 1997.

1. INTRODUCTION

One of the main tasks of the Statistical Office of the European Community consists in providing deciders with information about the economy of the Member States. This information is subject to a statistical treatment in order to meet the requirements of analysts and commentators. Typically, short-term analysis and the monitoring of the economy are conducted on the basis of seasonally adjusted series. Sometimes, when seasonally adjusted figures display too much erraticity, the attention is reported to a smoother signal such as the trend. Accordingly, EUROSTAT proceeds to seasonal adjustment and to trend extraction before publishing economic time series (see EUROSTAT 1997a).

Several methods for seasonal adjustment and trend extraction are available. Broadly speaking, they may be classified into three main groups: regression methods, empirical filtering and signal extraction. With the first one, the patterns of interest are represented as deterministic functions of time (see for example Hylleberg, 1986). It is perhaps the earliest model-based approach to seasonal adjustment and trend extraction, and was in use in EUROSTAT until recently with the software Dainties (see Fischer, 1995). The second group performs ad hoc application of moving average filters. The filters in use are said *empirical* because they do not depend on the statistical properties of the series under analysis: they are pre-existing filters and it is up to the user to select the most adequate one given the series under analysis. This is the principle implemented in the softwares of the X11-family (see Shiskin and al., 1967), which are very widely spread in public data-analysis agencies. The last approach, seasonal adjustment by signal extraction, has been developed by Burman (1980), Hillmer and Tiao (1982), among others (for a general presentation, see Maravall, 1993b). It is based on optimal filtering, the optimal filter being derived from a time series model of the ARIMA-type which describes the behaviour of the series while the components are explicitly specified. It is generally known as the ARIMA-Model-Based (AMB) approach to unobserved components analysis.

The comparison of the different approaches has been subject of a large debate in the statistical literature; see Bell and Hillmer, 1984. Yet the debate was oriented towards the search of an optimal criterion for evaluating seasonal adjustment procedures and with this perspective no definitive conclusion could be reached. Consequently, the evaluation of the relative performances of the different approaches is still an open question. Furthermore, EUROSTAT is confronted every day with the problem of choosing the method ensuring the highest quality data.

A glance at the situation in national statistical institutes of the European Union shows that practitioners favour ad hoc filtering through the general use of softwares of the X11 family (EUROSTAT 1997d). Two noticeable exceptions, however, are Bank of Italy and Bank of Spain, which have adopted AMB procedures (Bank of Italy, 1997,

and Bank of Spain, 1993). The situation is opposite on the side of academic research where model-based approaches prevail; see for example the references in Maravall, 1993b. The dichotomy between the applied importance of X11 and variants of, and the attention that academics devote to model-based methods to decompose economic time series, heightens the need of a rigorous assessment of the different approaches.

During 1995, EUROSTAT set up a program for investigating issues related to seasonal adjustment. The first step was an internal study comparing 6 different packages (see Fischer, 1995). It has led to the decision of concentrating the attention on X12-REGARIMA (X12 in short), a last update of the X11-family from the Bureau of the Census (see Findley and al., 1996), and on SEATS-TRAMO (see Gomez and Maravall, 1996) which implements the AMB approach to decompose time series. In brief, both programs are based on the following scheme: REGARIMA and TRAMO are respectively in charge of removing some deterministic effects like for example outliers and calendar effects, and of identifying and estimating linear stochastic models of the ARIMA-type for the remaining part of the series. It is that stochastic part which is then decomposed into seasonal, trend plus noise by X12 and by SEATS. The program X12 uses the forecasts made available by REGARIMA to extend the series before applying the adjustment filters and the trend filters. These filters were already present in X11, so X12 still embodies the X11 decomposition filters. On the other hand, SEATS uses the model identified and estimated by TRAMO to derive the optimal filters for estimating the different components. Details of the two decomposition procedures are given in sections 2 and 3.

The EUROSTAT activities in seasonal adjustment are currently developed in three main directions: evaluation and comparison of these two approaches, construction of a software embodying and interfacing X12 and SEATS-TRAMO, and training in applied time series analysis. The first one is mainly a research project, and it has given rise to a number of papers. Section 4 presents some of the main results which have been obtained, while section 5 gives an overview of the software project.

2. X11 LINEAR SEASONAL ADJUSTMENT FILTERS

We first present the principle of linear filtering. Writing B the backshift operator such that for a time series x_t , $Bx_t = x_{t-1}$, a linear time invariant filter can be expressed as:

$$(2.1) \quad a(B) = \sum_{k=-m}^r a_k B^k,$$

where the weights a_i are real, do not depend on time, and satisfy $\sum a_i = 1$ and $\sum a_i^2 < \infty$. The moving average filters most often employed share the property of being linear and, for observations not too close to both ends of the sample, symmetric. Such filters are

considered since they induce no phase shift in the filtered series (see Priestley, 1981). Hence $m = r$, and assuming that $a(B)$ is a seasonal filter the seasonal component estimator will be written as:

$$(2.2) \quad \begin{aligned} \hat{s}_t &= \left[a_0 + \sum_{k=1}^r a_k (B^k + B^{-k}) \right] x_t \\ &= a(B)x_t \end{aligned}$$

while the nonseasonal part of the series will be obtained as :

$$\hat{n}_t = [1 - a(B)]x_t$$

so that the additive relationship $x_t = \hat{s}_t + \hat{n}_t$ holds. If needed, the nonseasonal part of the series can be further decomposed into a trend plus an irregular component.

Given that an unobserved component like seasonality is built so as to catch the movements of a series at some specific frequencies, it is convenient to draw the interpretation of linear filters in the frequency domain. Let w denote frequency measured in radians, $w \in [0, \pi]$, then the frequency response function of $a(B)$ is given by:

$$(2.3) \quad a(w) = a(e^{-iw}) = a_0 + 2 \sum_{k=1}^r a_k \cos kw.$$

The squared gain of a filter defined by $|a(w)|^2$ relates the spectrum of the input series $g_x(w)$ to the spectrum of the component estimator $g_s(w)$ through the general expression:

$$g_s(w) = |a(w)|^2 g_x(w).$$

The squared gain controls the extent in which a movement of particular amplitude at a frequency w is delivered to the output series. For example, a zero-gain in $[w_1, w_2]$ corresponding to a response function vanishing in this band will make the output series free of movements in this range of frequencies. This is the principle adopted in empirical linear filtering as performed in X11 (which, we recall, is still embodied in X12). Actually, the decomposition of time series in X11 may also be multiplicative, but the linear filters can be seen as approximation of the multiplicative approach; see Young (1968). Dealing with linear filters eases the interpretation at the cost of missing some nonlinearities, which according to Young are in general not important.

The linear filters in X11 can be seen as convolutions of moving averages. Details of the procedure can be found in Wallis (1974, 1982). According to the filter chosen at each step, a different outcome is obtained. For monthly series, standard options

for seasonal moving average filters are 3×3 , 3×3 followed by 3×5 (default), 3×9 and 3-term seasonal average filters. These are combined with a Henderson trend filter, whose standard length may be 9, 13, 23 terms. Graphics of the filters weights and squared gains can be found in numerous articles; the most complete may be Bell and Monsell (1992). For convenience, we reproduce the squared gains of the monthly seasonal adjustment filters. Namely, the default, 3×3 , 3×9 , and 3-term filters associated with a 13-term Henderson moving average are presented; the 3×5 is omitted since it does not differ very much to the default (see Bell and Monsell).

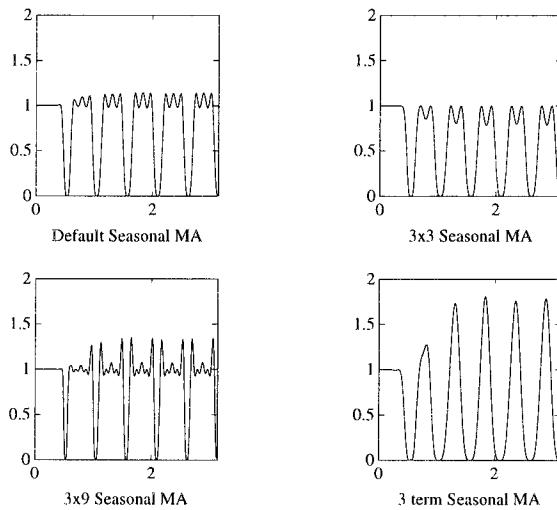


Figure 1. Squared Gain Functions of X11 Monthly Adjustment Filters

The graphics displayed in figure 1 illustrates how X11-filtering works in the frequency domain. The seasonal component is designed to capture the movements in the series which occur with a seasonal frequency. Thus the seasonal adjustment filters should annihilate the variability associated with the seasonal frequencies, and let the other unchanged. In agreement with that, the gain of the X11 adjustment filters presented on figure 1 displays that bandpass structure: they show a gain close to 0 around the seasonal frequencies and a gain close to one in the other regions. The width of the region where the gain is null is related to the stability of the seasonal movements which are supposed to be removed: for example, an unstable seasonal pattern yields large spectral peaks around the seasonal frequencies, and hence the range of frequencies where an adjustment filter should display a zero-gain must be sufficiently large to match them. Figure 1 shows that the 3-term seasonal filter would be adequate for a relatively unstable seasonality while the 3×9 filter corresponds to a relatively stable seasonality. Given the series under analysis, it is up to the user to select

the filter which is believed to be the more appropriate. The X12 software helps in that task by delivering empirical measurement like irregular-to-seasonal ratio or cycle-to-irregular ratio (see Dagum, 1988) which are designed to indicate whether the seasonality is stable or not, or also whether the series presents a seasonal behaviour or not. However, for series displaying seasonal movements whose characteristics would be more accentuated than the two extreme patterns that the 3×9 and 3-term filters are able to accommodate, then respectively too much or not enough seasonality would be removed by simple application of these filters. This is an important feature of X11 that we shall discuss further in section 4.

3. ARIMA-MODEL-BASED SIGNAL EXTRACTION

The signal extraction approach to seasonal adjustment consists in estimating an unobserved seasonal component s_t having observation on a series x_t such that:

$$x_t = s_t + n_t,$$

where n_t represent the nonseasonal part of the series, independent of s_t . This problem can be solved using the so-called «Wiener-Kolmogorov» (WK) filter. The WK filter is also a linear moving average filter, but the main difference with ad hoc filters lies in the way that it is constructed: the WK filter is built so as to minimise the mean squared errors in the estimator. The component estimator corresponds to the linear projection of the unobserved component on the series; it gives the conditional expectation of the component.

Under the assumptions that the components are orthogonal and that an infinite realisation of the series is available, the WK filter $v_s(w)$ is given by the ratio of the component spectrum to the series spectrum (see Whittle, 1983). Let the seasonal spectrum and the series spectrum be denoted $g_s(w)$ and $g_x(w)$, respectively. Then, for stationary series,

$$(3.1) \quad v_s(w) = \frac{g_s(w)}{g_x(w)},$$

and, using the Fourier Transform, the estimator of the seasonal component is:

$$(3.2) \quad \hat{s}_t = v_s(B)x_t.$$

It has been shown that the WK still yields consistent estimates when the series is nonstationary (see, for example, Pierce (1979) or Bell (1984)).

Cleveland and Tiao (1976) and Burman (1980) have suggested to use the signal extraction theory in conjunction with the specification of stochastic linear models of

the ARIMA-type for the series and for the components. A simple reason for that is that the ARIMA models provide a very simple way to parametrize a spectrum (see Box and Jenkins, 1970). Typical models for the seasonal component are:

$$S(B)s_t = \theta_s(B)a_{st}$$

where $S(B) = 1 + B + \dots + B^{m-1}$, m being the data-periodicity (e.g. 12 for monthly series), $\theta_s(B)$ a polynomial of order at most $m - 1$, and a_{st} is an independent white noise variable normally distributed. Importantly, this specification let the sum of m consecutive seasonal movements be zero in expectation.

In the time domain, the WK filter can be seen as the ratio of the component AutoCorrelation Generating Function (ACGF) to the series ACGF, which are straightforwardly available from the ARIMA modelling. Hence, the historical WK filter is symmetric, as the X11 central filters. It is also convergent, so it is valid for computing the estimators in the central periods of the samples. At the end of the sample, preliminary estimates are obtained by replacing unknown future observations with their forecasts.

In practice, the selection and estimation of an ARIMA model for the observed series is conducted using the well-known Box-Jenkins techniques, and the spectrum associated with that model is decomposed by partial fraction decomposition. However, the derivation of a model for the unobserved components is subject to an important identification problem. In general, when a time series admits a decomposition into unobservables, the number of admissible decompositions is infinite. In the ARIMA-model-based approach, the selection of a single one is operated by maximizing the irregular component variance (see Hillmer and Tiao 1982). This yields the canonical decomposition, where the canonical components display a zero in their spectra.

Looking at the WK filter in the frequency domain, it is easily seen that it displays a band pass structure similar to that of X11. From (3.1), and using $g_x(w) = g_n(w) + g_s(w)$, we have

$$(3.3) \quad v_s(w) = \frac{1}{1 + \frac{g_n(w)}{g_s(w)}}.$$

When the relative contribution of the seasonal component is large at a particular frequency w^* , we have $g_n(w^*)/g_s(w^*) \approx 0$. In that case, most of the observed series spectrum is used for the signal estimation: the gain of the filter for this frequency will be close to one. Conversely, when the relative contribution is low at a particular frequency, the WK filter just ignores it for the signal estimation. For example, if the nonseasonal component embodies a nonstationary long term trend, then the spectrum of n_t is infinite in the low frequencies region, and we will have $g_n(w^*)/g_s(w^*) \rightarrow \infty$. It follows that $v_s(w^*) \approx 0$, and the gain will be close to zero in this area: no low-frequencies variations are passed to the seasonal component. Given that both are

moving averages, the band-pass interpretation of the X11 filters and of the WK filter is similar. The main difference is that the WK filter adapts itself to the stochastic properties of the series under analysis, while the X11 filters do not: they are ad hoc (see for example Maravall, 1993a).

4. AD HOC FILTERING AGAINST SIGNAL EXTRACTION: PRELIMINARY RESULTS

4.1. Methodology

The obvious way to perform a comparison is to define a criterion, to design a situation where to implement the different methods, and to evaluate the relative performances of the alternatives with respect to this criterion. Unfortunately, defining a criterion for evaluating seasonal adjustment procedures seems to be an hopeless task; mainly because, as noted in Bell and Hillmer (1984), «different methods produce different adjustments because they make different assumptions about the components and hence estimate different things». In the unobserved component analysis framework, the possibility of different assumptions does exist since in general the decompositions are not identified. Consequently, a direct comparison of the outputs of the different approaches is not informative. In this respect, the analysis being conducted at EUSTAT follows another strategy, which simply consists in studying the theoretical properties of the different methods in order to point out their relative advantages and drawbacks.

Consider for example the case of regression methods. These typically specify the unobserved components as deterministic functions of time. Hence, by construction, the components are constrained to exactly reproduce their previous behaviour. Given that most of the economic time series are characterised by moving trends and by evolving seasonal patterns, this modelling has soon been found very restrictive and unsuited to many applied cases. Accordingly, regression methods have been gradually replaced by more flexible procedures, such as moving averages methods.

In a similar way, we concentrate on the properties of X11 filters and of AMB-signal extraction. Of course, for such a comparison to be conclusive, the investigations must be as deep and complete as possible. The applied relevance is put forward so as to inform the practitioners about some situation profiles where one approach can be superior to the other.

4.2. Series with Extreme Patterns

The main discrepancy between ad hoc filtering and AMB approach is that this last designs the signal extraction filter according to the stochastic properties of the series

under analysis. In cases of series with extreme characteristics, the consequences of that discrepancy can be very apparent. Two cases of extreme patterns can be encountered in practice: series with a component displaying either a very unstable behaviour or a very stable, close-to-deterministic behaviour.

The first case is studied in Fiorentini and Planas (FP) (1997a), where it is pointed out that series embodying a very unstable pattern may be difficult to decompose with the AMB approach: typically, problems of nonadmissibility arise. The canonical requirement would identify a nonseasonal component with negative values in its spectrum, which is not acceptable. This problem does not arise with ad-hoc filtering since the components are never directly specified but are output of the filtering process. A simple solution available consists of decomposing an approximated model. An alternative developed by FP considers higher-order models for the seasonal component. This exact solution was then used as a basis for evaluating the performances of the approximate solution and for comparing them with the performances of ad-hoc filtering. The X11 filter considered was the 3×3 adjustment filter, the most adequate for unstable seasonality. An important finding of that study was that the range of filters available with X11 is too limited to be able to deal correctly with very unstable patterns. In the case of a series characterised by a very unstable seasonality, an underadjustment could clearly be seen: some seasonal fluctuations were still present in the X11 adjusted series.

The opposite case of close-to-deterministic patterns is analysed in Maravall and Planas (MP) (1997). Deterministic patterns cause problem to the AMB approach since optimal signal extraction cannot be performed in noninvertible models. Only an approximation to the optimal decomposition is available in SEATS. Ad hoc filtering, by construction, does not face any theoretical problem with noninvertible processes. MP were able to extend the WK filter to that case, and they evaluated the performance of the approximated solution and of X11-filtering. The attention focused on the 3×9 adjustment filter with a 23-term Henderson trend estimator. While the approximated solution was found to accommodate in a satisfactory way situations of close-to-deterministic patterns, the use of the 3×9 X11 filter was seen to be too much restrictive: an overestimation of the seasonality could be found. This overestimation was due to an inadequate separation between noise and seasonal movements.

4.3. Series with Common Patterns

Most of time series encountered in practice display more regular movements. For these cases, the default X11 filter and the optimal signal extraction filter can be very close. Yet, Planas (1997c) shows that some differences can still be found which are mainly due to the property of the X11 default adjustment filter to display gains higher than one at some frequency between the seasonal harmonics. As a consequence, short-term movements in the series are amplified in the adjustment process, and in

the case of the French Total Industry Production (FTIP) series, an overestimation of the irregular could be seen. While the canonical decomposition is designed to maximise the irregular component variance, the irregular obtained from X11 in the FTIP series was subject to more volatility than the canonical one. This amplification of the short-term movements could then be seen in the month-to-month growth rate of the adjusted series.

4.4. About the Identification Problem

One of the main reason which invalidates direct comparison between the outputs of different seasonal adjustment procedures is that unobserved components are not identified. Every approach makes a different identifying assumption. This assumption is explicitly made in the AMB approach: according to the canonical requirement, a signal free of noise is selected among the admissible decompositions of a given observed series model. Further, the estimation accuracy is related to the unobserved components models specification. Maravall and Planas (1996) explored that dependence, and they show that a canonical decomposition always minimises the variance of the error in historical and in any preliminary estimator among the range of the admissible decompositions. On the contrary, they show that a canonical decomposition always maximizes the variance of revisions. It should be underlined that this result only concerns the range of admissible decompositions of a given model; it does not state that the revisions will be higher than the one obtained with any other method. MP also pointed out that in two-component decompositions they are two canonical decompositions, and that it may perfectly be the case that the other canonical decomposition minimises the revision variance.

4.5. About Preadjustment Procedures

As mentioned in introduction, both programs embody a preadjustment procedure which consists mainly in correcting for calendar effect and for outliers, and in identifying a stochastic linear model of the Arima-type for the series under analysis. Part of the comparisons focused thus on that stage (see EUROSTAT, 1996a). If REGARIMA and TRAMO implement basically the same method for calendar effect corrections and close procedures for outlier detection and identification, some discrepancies could be found in the automatic model identification process. But the major discrepancy which could be pointed out concerned the computing time: processing a set of 358 series with different options, TRAMO has been found to be at the minimum 3 times faster than Regarima.

Given that the AMB-signal extraction derives the optimal filter from a stochastic linear model of the ARIMA-type fitted to the series under analysis, the quality of the decomposition is related to the capability of the outlier removing procedure to linearize time series which present nonlinearities. Planas (1997a) investigated that point, and

a major finding of this study is that, provided the nonlinearities do preserve the white noise property of the innovations on the observed series, then: (i) outlier removing is effectively able to linearize time series which present nonlinearities; (ii) the optimal estimator is stable with respect to nonlinear mispecifications; (iii) the nonlinearities are most often assigned to the irregular component.

5. DEVELOPMENT OF AN INTERFACE FOR SEASONAL ADJUSTMENT

In addition to the methodological work, EUROSTAT is currently supporting the development of a software for seasonal adjustment. This software will embody both X12 and TRAMO-SEATS and will provide users with a friendly interface to these two programs. The product is developed first for EUROSTAT internal needs, but it will be made available to the public on request.

Environment-specific interfaces are already available: GAUSS and EXCEL interfaces for SEATS-TRAMO and X12 have been built at EUROSTAT, while D.Ladiray and K.Attal, INSEE, France, has developed an interface for SAS environment. The product in construction will be more powerful, since it is aimed at covering all the main tasks of statistical production in official institutes. The main functions will be: seasonal adjustment and trend extraction in large-scale and in detailed analysis, forecasting in large-scale and automatic analysis of data-irregularities. Large-scale procedures will allow the fully automatic treatment of sets of thousands of series, and input/output direct access to databases like Fame will be offered.

The main computations include all the possibilities of X12 and SEATS-TRAMO: pre-adjustment by outlier removing and calendar effect corrections, automatic model identification, forecasts, seasonal adjustment and trend estimation, diagnostic checking and analysis of decomposition accuracy. Besides the fully menu-driven package which will mask the syntax of X12 and of SEATS-TRAMO, some assistance including fully automatic treatment of problematic series will be provided to the users. Graphs and tables will facilitate the reading of the outputs, the comparison between several results corresponding to different options, and also the comparison between X12 and SEATS-TRAMO in practical cases.

The main appeals of that software will lie first in the application of applied time series techniques to massive sets of series, and second in the explicit consideration of the needs of production units in statistical institutions. A full description of the specifications can be found in EUROSTAT (1997b), while the computational analysis of the project is detailed in EUROSTAT (1997c). A beta version is planned for January 1998. The software host environment will be Windows NT.

CONCLUSION

Regarding methodological studies, there are still a large number of issues to be investigated. If some empirical investigations on revisions in preliminary estimators obtained with empirical and optimal filtering have been conducted (see EUROSTAT 1996b), the problem of long-term revisions in the AMB approach remains of particular interest. Further, the seasonal adjustment of sets of time series subject to balancing constraints is still an open question. More generally, important issues are related to the multivariate extensions of AMB approach and to seasonal adjustment in nonlinear situations. The decomposition of series characterised by bilinear and by ARCH patterns have been analysed in Maravall (1983) and in Fiorentini and Maravall (1995). These patterns could be completed by other types of nonlinearities with the perspective of an automatic treatment of nonlinear patterns in massive analysis of time series. Finally, economists have shown a renewed interest in the seasonal movements of macroeconomic series. For example, Miron and Beaulieu (1996) discuss how some information relevant for the knowledge of business cycles can be found in the seasonal fluctuations. An interesting problem for time series analysts is thus the design of statistical tools helping economists in drawing conclusions about possible relationships between seasonal fluctuations and business cycles.

Besides methodological studies and software questions, a training program has been set up. During 1997, two sessions of Training for European Statisticians have been devoted to seasonal adjustment methods with Agustín Maravall, Bank of Spain, as course leader. Also, an internal course on applied time series analysis has taken place. This internal course is delivered by C. Planas on the basis of a textbook written for the occasion (see Planas 1997).

REFERENCES

- [1] **Bank of Italy** (1997). *Economic Bulletin*, February.
- [2] **Bank of Spain** (1993). *Boletín Económico*, February.
- [3] **Bell, W.R.** (1984). «Signal Extraction for Nonstationary Time Series», *The Annals of Statistics*, **12**, 2, 646–664.
- [4] **Bell, W.R. and Monsell, B.C.** (1992). «X-11 Symmetric Linear Filters and their Transfer Functions», *Bureau of the Census, Research Report n. RR 92/15*, Washington.
- [5] **Box, G.E.P. and Jenkins, G.M.** (1970). *Time Series Analysis: Forecasting and Control*, San Francisco: Holden Day.

- [6] **Burman, J.P.** (1980). «Seasonal Adjustment by Signal Extraction», *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. A*, **143**, 321–337.
- [7] **Burridge, P.** and **Wallis, K.F.** (1984). «Unobserved Component Models for Seasonal Adjustment Filters», *Journal of Business and Economic Statistics*, **2**, 350–359.
- [8] **Cleveland, W.P.** and **Tiao, G.C.** (1976). «Decomposition of Seasonal Time Series: a Model for the X-11 Program», *Journal of the American Statistical Association*, **71**, 581–587.
- [9] **Dagum, E.B.** (1988). «The X11-ARIMA/88 Seasonal Adjustment Method - Foundations and User's Manual», *Time Series Research and Analysis Division*. Statistics Canada, Ottawa.
- [10] **Eurostat** (1996a). «Comparison of REGARIMA and TRAMO», *Working Group doc.* D3/SA/07.
- [11] **Eurostat** (1996b). «Revisions in Seasonal Adjustment Methods: and Empirical Comparison», *Working Group doc.* D3/SA/08.
- [12] **Eurostat** (1997a). *Industrial Trends*, monthly statistics.
- [13] **Eurostat** (1997b). «Specifications for the TRAMO-SEATS/X12 interface», *doc. I to III*.
- [14] **Eurostat** (1997c). «Analytic document for the TRAMO-SEATS/X12 interface».
- [15] **Eurostat** (1997d). «Results of the Survey of National Statistical Offices and Central Banks».
- [16] **Findley, D.F., Monsell, B.C., Bell, W.R., Otto, M.C. and Chen, B.C.** (1996). «New Capabilities and Methods of the X-12-ARIMA Seasonal Adjustment Program», U.S. Bureau of the Census, mimeo, May 16, 1996.
- [17] **Fiorentini, G. and Maravall, A.** (1996). «Unobserved Components in ARCH Models: An Application to Seasonal Adjustment», *Journal of Forecasting*, **15**, 175–201.
- [18] **Fiorentini, G. and Planas, C.** (1997a). «Non Admissiblity and The Specification of Unobserved Component Models», *Eurostat Working paper 9/1997/A/3*.
- [19] **Fiorentini, G. and Planas, C.** (1997b). «From Autocovariances to moving Averages: An Algorithm Comparison», mimeo, Eurostat.
- [20] **Fischer, B.** (1995). *Decomposition of Time Series: Comparing Different Methods in Theory and Practice*, Eurostat.
- [21] **Gómez, V. and Maravall, A.** (1996). «Programs SEATS and TRAMO: Instructions for the User», *Working Paper N° 9628*, Bank of Spain.

- [22] **Hillmer S.C.** and **Tiao G.C.** (1982). «An ARIMA-Model-Based Approach to Seasonal Adjustment», *Journal of the American Statistical Association*, **77**, 63–70.
- [23] **Hylleberg, S.** (1986). *Seasonality in Regression*, New York: Academic Press.
- [24] **Maravall, A.** (1983). «An Application of Non-Linear Time Series Forecasting», *Journal of Business Economics and Statistics*, **1**, 66–74.
- [25] **Maravall, A.** (1993a). «Stochastic Linear Trends: Models and Estimators», *Journal of Econometrics*, **54**, 1–33.
- [26] **Maravall, A.** (1993b). «Unobserved Components in Economic Time Series», *Handbook of Applied Econometrics*, ed. M.H. Pesaran, T. Schmidt, M. Wickens, Oxford Basil Blackwell.
- [27] **Maravall, A.** and **Planas, C.** (1996). «Estimation Error and The Specification of Unobserved Component Models», forthcoming in *Proceedings of the 1996 ASA meeting*, section Business and Economic Statistics.
- [28] **Maravall, A.** and **Planas, C.** (1997). «Signal Extraction in NonInvertible ARI-MA Models», mimeo.
- [29] **Miron, J.A.** and **Beaulieu, J.J.** (1996). «What Have Macroeconomists Learned about Business Cycles from the Study of Seasonal Cycles», *The Review of Economics and Statistics*, **vol. LXXVIII**, 54–66.
- [30] **Pierce, D.A.** (1979). «Signal Extraction Error in Nonstationary Time Series», *Annals of Statistics*, **7**, 1303–1320.
- [31] **Planas, C.** (1995). «Estimation Error in Unobserved Component Models», *Ph.D. Dissertation*, Department of Economics, European University Institute, Florence, Italy.
- [32] **Planas, C.** (1997a). «Linear Signal Extraction with Intervention Techniques in Nonlinear Time Series», *Eurostat Working Paper 9/1997/A/1*.
- [33] **Planas, C.** (1997b). *Applied Time Series Analysis: Modelling, Forecasting, Unobserved Components Analysis and the Wiener-Kolmogorov Filter*, Eurostat.
- [34] **Planas, C.** (1997c). «Short-Term Volatility in Seasonally Adjusted Series», *Eurostat Working paper 9/1997/A/2*.
- [35] **Priestley, M.B.** (1981). *Spectral Analysis and Time Series*, New York: Academic Press.
- [36] **Shiskin, J., Young, A.H. and Musgrave, J.C.** (1967). «The X-11 Variant of the Census Method II Seasonal Adjustment Program», *Technical Paper 15*, Washington, D.C.: Bureau of the Census.

- [37] **Wallis, K.F.** (1974). «Seasonal Adjustment and Relations between Variables», *Journal of the American Statistical Association*, **69**, 18–31.
- [38] **Wallis, K.F.** (1982). «Seasonal Adjustment and Revisions of Current Data: Linear Filters for the X11 Method», *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. A*, **145**, 74–85.
- [39] **Young, A.H.** (1968). «Linear Approximation to the Census and BLS Seasonal Adjustment Methods», *Journal of the Royal Statistical Society, Ser. A*, **145**, 74–85.

Biometria

Consell Directiu de la «Regió Espanyola de la International Biometric Society» (1998)

President: E. Carbonell
Vicepresident: C.M. Cuadras
Secretari: F. López-Santovería
Tresorer: M. Dolores Sánchez
Vocals: J.L. Chorro
R. Estarelles
G. Gómez (corresponsal del Biometric Bulletin)
M. Ríos
M.J. Bayarri
J.L. González Andújar
A. Sánchez

Adreça electrònica: <http://www.iata.csic.es/IBSREsp/>

MODELIZACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN ESPACIAL DE QUISTES EN EL ESTÓMAGO DE LA MARSOPA MEDIANTE UN PROCESO DE GIBBS*

JORGE MATEU*

FRANCISCO MONTES**

En un trabajo previo (Balaguer et al., 1992) los autores estudiaron la distribución espacial de los quistes en el estómago de la marsopa para contrastar su compatibilidad con la hipótesis de aleatoriedad espacial completa (AEC). El resultado condujo a rechazar la hipótesis señalando en la dirección de un patrón agregado, confirmando la sospecha inicial de los zoólogos.

Este trabajo completa aquel estudio en la dirección que parece más coherente a sus autores: la de conjeturar un modelo puntual espacial con interacciones dos a dos (un proceso de Strauss) y estimar sus parámetros. Previamente se lleva a cabo el imprescindible desarrollo teórico poniendo el énfasis en los distintos métodos de estimación máximo-verosímil.

Modelling the spatial distribution of cysts placed in a porpoise stomach using a Gibbs process.

Palabras clave: Procesos puntuales finitos, procesos de Gibbs, procesos de Strauss.

* Este trabajo ha sido financiado parcialmente con la ayuda de la Generalitat Valenciana GV-2221-94 y la Fundació Bancaixa P1A94-25.

* Jorge Mateu. Departamento de Matemáticas de la Universitat Jaume I. 12071 Castellón.

** Francisco Montes. Departamento de Estadística e I.O. de la Universitat de València. 46100 Burjassot. València.

– Recibido en mayo de 1996.

– Aceptado en septiembre de 1997.

1. INTRODUCCIÓN

En el estómago principal de algunos cetáceos como la *marsopa común* y el *delfín listado*, aparecen quistes producidos por unos parásitos, los *trematodos*, especie de gusanos planos que se fijan en la pared del estómago y producen los quistes. Esta investigación comenzó con una única imagen digitalizada de una sección plana del estómago de una marsopa en la que aparecían 10 quistes y se disponía, por tanto, de un patrón puntual con 10 sucesos. Los biólogos involucrados en el estudio conjecturaban una alineación y concentración de los quistes cerca del conducto que conecta el estómago principal con el pilórico. El análisis de este problema intenta dar una solución a las hipótesis iniciales planteadas (Balaguer *et al.*, 1992).

Desde el punto de vista estadístico, el problema puede plantearse como el estudio del patrón espacial que siguen n sucesos $\{s_i = (x_i, y_i) : i = 1, \dots, n\}$ situados en una región del plano. En la *figura 1*, digitalización de una imagen real, se esquematiza la situación: se observan 10 pequeños cuadrados blancos que localizan los quistes en el estómago extendido de una marsopa, que en la figura aparece como una región irregular del plano.

La hipótesis marco a contrastar es la de la *Aleatoriedad Espacial Completa* (AEC) en la que se verifican las dos condiciones siguientes:

- (i) El número de sucesos en una región X de área $S(X)$ sigue una distribución de Poisson de parámetro $\lambda S(X)$.
- (ii) Dados n sucesos en una región X , éstos se distribuyen *independiente y uniformemente* en X .

Ambas condiciones configuran lo que se denomina *proceso puntual de Poisson*.

La alternativa a la AEC no es obviamente única, pero una aproximación prudente y realista contempla como alternativas naturales aquellas en las que la presencia de algún mecanismo, inherente al fenómeno, alienta o inhibe la presencia de sucesos en el entorno de algún suceso ya existente, situaciones que se conocen con el nombre de proceso *cluster de Poisson* o *proceso hard-core* respectivamente. En (i), la constante λ es la intensidad o el número medio de sucesos por unidad de área. De acuerdo con (i), la AEC implica que la intensidad de los sucesos no varía en el plano. La condición (ii) impide la existencia de interacciones entre los sucesos. Por ejemplo, la independencia de (ii) sería violada si la existencia de un suceso en s inhibiera o primara la ocurrencia de otros sucesos en la vecindad de s .

En (Balaguer *et al.*, 1992) se contrasta la AEC mediante métodos de distancias llegando a la conclusión que dicho patrón puntual no es aleatorio (patrón de Poisson)

destacando una mayor presencia de distancias pequeñas lo que se traduce en una tendencia a la agregación y formación, por tanto, de un patrón cluster.

Teniendo en cuenta que nuestro patrón puede ser considerado como un proceso puntual en un dominio acotado en el que el número total de sucesos es finito con probabilidad 1, podemos analizarlo como un proceso puntual finito. En este sentido, los procesos de Gibbs nos sirven de marco para modelizar nuestro patrón. Este patrón envuelve una cierta dependencia local o markoviana. Los biólogos conjeturan que las interacciones entre los sucesos son un pilar fundamental para la modelización de dicho patrón. Esto nos lleva a considerar los procesos puntuales Pairwise Interaction como el modelo más adecuado en nuestro caso.

Una hipótesis fundamental en el análisis es que el patrón puntual puede ser considerado como una realización parcial de un proceso puntual estocástico (Cox *et al.*, 1980). Llamamos al conjunto de datos anterior, un **patrón puntual espacial** y nos referiremos a las localizaciones del patrón como **sucesos** para distinguirlas de los puntos arbitrarios de la región de estudio. Un patrón puntual contiene información sobre el fenómeno en estudio, es por ello que su análisis puede ser usado para describir y modelizar propiedades de dicho fenómeno (Mateu y Montes, 1994; Mateu *et al.*, 1995).

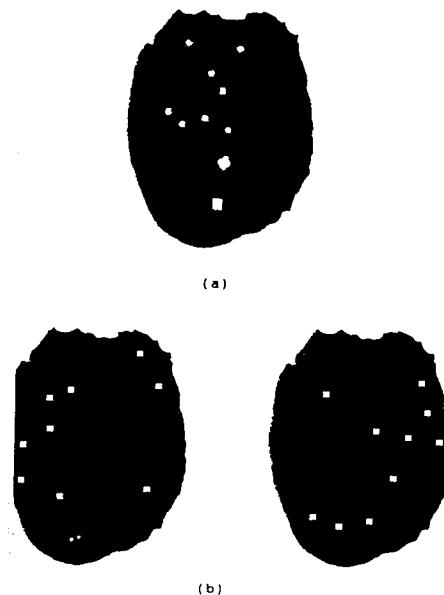


Figura 1. (a) Imagen real del estómago de la marsopa.
(b) Simulaciones bajo AEC del patrón.

2. PROCESOS PUNTUALES FINITOS: PROCESOS DE GIBBS

2.1. Procesos puntuales finitos

De manera informal, un proceso puntual es un modelo estocástico que genera localizaciones de sucesos $\{s_i\}$ en algún conjunto X . Puesto que nuestro interés se centra en los *procesos puntuales espaciales*, X será un subconjunto de \mathbb{R}^d , aunque X podría ser cualquier espacio Hausdorff localmente compacto cuya topología tiene una base numerable (Cressie, 1991).

En lo que sigue, χ denotará la σ -álgebra de Borel de $X \subset \mathbb{R}^d$ y v la medida de Lebesgue en X , siendo $v(B) = |B|$ el volumen (área en \mathbb{R}^2) de B . La forma más natural de definir un *patrón puntual espacial* (una realización de un proceso puntual espacial), es a través de las localizaciones de los sucesos s_1, s_2, \dots en X . Sin embargo, a menudo es matemáticamente más conveniente definir un patrón puntual mediante *medidas de conteo* Φ en X . Para cada conjunto de Borel B , $\Phi(B)$ es el número de sucesos en B ; así $\Phi(B) \in \{0, 1, 2, \dots\} \forall B \in \chi$. Asumimos que la medida de conteo Φ es localmente finita, es decir, $\Phi(B) < \infty, \forall B_{\text{acotado}} \in \chi$. Conocer $\Phi(B) \forall B \in \chi$ es equivalente a conocer las localizaciones espaciales de todos los sucesos s_1, s_2, \dots en X .

Recuérdese que, para un proceso puntual de Poisson, condicionando al número total de sucesos en una región acotada, éstos individualmente pueden ser tratados como independientes e idénticamente distribuidos en la región. Esto sugiere un enfoque alternativo para especificar la estructura de un proceso puntual en un dominio acotado, o más generalmente, la de *cualquier proceso puntual en el que el número total de sucesos es finito con probabilidad 1*. A tales procesos se les llama *procesos puntuales finitos (PPF)*. La alternativa sugerida consiste en:

1. Especificar la distribución del número total de sucesos $N = n$,
2. Dado $N = n$, especificar la distribución conjunta de los sucesos en la región.

Tales procesos puntuales surgen de forma natural como modelos para poblaciones de animales, insectos y plantas en el campo ecológico y como modelos para procesos de partículas en Física.

Definición 1:

Las condiciones que fundamentan un proceso puntual finito son:

1. Los sucesos se localizan en un espacio métrico completo y separable (e.m.c.s.) X , como por ejemplo $X = \mathbb{R}^d$.

2. Se considera una distribución $\{p_n\}$ ($n = 0, 1, \dots$) que determina el número total de sucesos en la población, cumpliendo $\sum_{n=0}^{\infty} p_n = 1$.
3. Para cada entero $n \geq 1$, se tiene una distribución de probabilidad $\Pi_n(\cdot)$ sobre los conjuntos de Borel de $X^n = X \times \dots \times X$ que determina la distribución conjunta de las posiciones de los sucesos del proceso dado que el número total de sucesos es n .

Las condiciones anteriores proporcionan una guía para la *simulación de los procesos puntuales finitos*. En primer lugar, generar un número aleatorio N según la distribución $\{p_n\}$ (señalar que $\Pr\{0 \leq N < \infty\} = 1$). Posteriormente, suponiendo que $N = n$ (si $n = 0$ no hay nada que hacer), generar un vector aleatorio (s_1, \dots, s_n) según la distribución $\Pi_n(\cdot)$.

Cuando se habla de procesos puntuales estocásticos, se trabaja inherentemente con conjuntos de sucesos *sin orden*. Por tanto, para ser consistentes con el tratamiento de los procesos puntuales como una teoría de conjuntos sin orden, consideramos que las distribuciones $\Pi_n(\cdot)$ deben asignar el mismo peso a cada una de las $n!$ permutaciones de las coordenadas de (s_1, \dots, s_n) , o en otras palabras, $\Pi_n(\cdot)$ debe ser *simétrica*. Si no lo es, podemos simetrizarla de la siguiente forma. Sea (A_1, \dots, A_n) una partición de X , entonces,

$$\prod_n^{sim}(A_1 \times \dots \times A_n) = (n!)^{-1} \sum_{perm} \prod_n(A_{i_1} \times \dots \times A_{i_n})$$

en la que \sum_{perm} se calcula sobre todas las $n!$ permutaciones (i_1, \dots, i_n) de los enteros $(1, \dots, n)$.

Una formulación alternativa, más ventajosa, utiliza las *medidas de Janossy* (J_n) (no son de probabilidad) introducidas por Janossy (1950),

$$J_n(A_1 \times \dots \times A_n) = p_n \sum_{perm} \prod_n(A_{i_1} \times \dots \times A_{i_n}) = n! p_n \prod_n^{sim}(A_1 \times \dots \times A_n).$$

Una de las ventajas de estas medidas es su simple interpretación. Si, por ejemplo, $X = \mathbb{R}^d$ y $j_n(s_1, \dots, s_n)$ es la densidad de $J_n(\cdot)$ con respecto a la medida de Lebesgue en $(\mathbb{R}^d)^{(n)}$ con $s_i \neq s_j$ para $i \neq j$, entonces, $j_n(s_1, \dots, s_n) ds_1 \dots ds_n = \Pr\{\text{haya exactamente } n \text{ sucesos en el proceso, cada uno en las } n \text{ regiones infinitésimas distintas } (s_i, s_i + ds_i)\}$.

La condición normalizadora $\sum p_n = 1$ toma la forma

$$(1) \quad \sum_{n=0}^{\infty} (n!)^{-1} J_n(X^n) = 1$$

interpretando $J_0(X^0) = p_0$ y para $n \geq 1$ se tiene que

$$J_n(X^n) = p_n \sum_{perm} \prod_n(X^n) = n! p_n.$$

La siguiente proposición establece formas equivalentes de definir un *PPF*.

Proposición 1:

Sea X un e.m.c.s. y sea $\chi^{(n)}$ la σ -álgebra producto de X^n . Entonces los siguientes apartados son equivalentes y cada uno es suficiente para definir un proceso puntual finito en X :

1. Una distribución de probabilidad $\{p_n\}$ sobre los enteros no negativos y una familia de distribuciones de probabilidad simétricas $\Pi_n^{sim}(.)$ en $\chi^{(n)}$, $n \geq 1$, con la convención de que $\Pi_n^{sim}(X^0) = p_0$ y el conjunto X^0 denota un punto aislado de forma que $X^0 \times X = X = X \times X^0$.
2. Una familia de medidas simétricas no negativas $J_n(.)$ en $\chi^{(n)}$, $n \geq 1$, satisfaciendo una condición normalizadora (1) con $J_0(X^0) = p_0$, un escalar no negativo.
3. Una medida de probabilidad P sobre los conjuntos de Borel de la unión contable $X^\cup = X^0 \cup X^1 \cup X^2 \cup \dots$. En Moyal (1962) se define (X^\cup, P) como el espacio de probabilidad canónico de un proceso puntual finito.

Para una visión más completa de los PPF pueden consultarse las referencias Daley y Vere-Jones (1988) y Cressie (1991).

2.2. Procesos de Gibbs

Una clase fundamental de procesos puntuales que surgió de la Física Estadística, es la clase de los procesos de Gibbs. Éstos forman una familia natural de modelos para patrones puntuales en los que la formación del patrón es una consecuencia de las interacciones entre los sucesos.

Un proceso de Gibbs adecuado a nuestro problema y de fácil interpretación es el modelo propuesto por Strauss (1975) en el que la densidad depende sólo del número de pares de sucesos vecinos. La densidad de Janossy de un proceso de Strauss (o equivalentemente la verosimilitud $l(.; \theta)$, siendo $\theta = (\beta, \gamma)$), toma la forma (Kelly y Ripley, 1976)

$$(2) \quad l(s_1, \dots, s_n; \theta) = j_n(s_1, \dots, s_n; \theta) = e^{-|X|} \alpha^{-1} \beta^n \gamma^{\gamma_n}$$

siendo β y γ los parámetros no negativos del modelo, α una constante normalizadora, $|X|$ corresponde al área de la región donde se observan los sucesos e Y_n representa el número de pares de sucesos vecinos definido por

$$Y_n(s_1, \dots, s_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} I[\|s_i - s_j\| \leq r].$$

siendo r un valor prefijado que delimita el radio de vecindad e I la función indicatriz que toma el valor 1 si se cumple la condición establecida y 0 en otro caso.

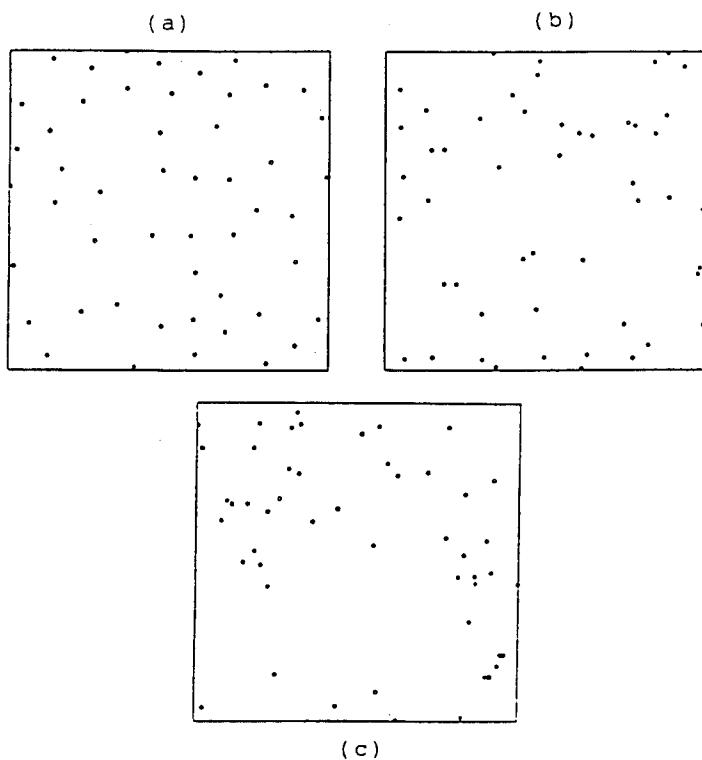


Figura 2. Simulaciones de un proceso de Strauss: 50 puntos en un cuadrado unidad con $r = 0.1$.

- (a) $\gamma = 0$
- (b) $\gamma = 1/2$
- (c) $\gamma = 1$

El proceso de Strauss es un modelo puntual comúnmente utilizado en aplicaciones espaciales, pues dependiendo del valor del parámetro γ podemos modelizar cualquier alternativa a un proceso de Poisson. De esta forma, el caso $\gamma = 1$ se corresponde con un proceso de Poisson con intensidad β ; $\gamma < 1$ indica regularidad en el patrón; $\gamma = 0$ proporciona un proceso de inhibición simple, *proceso hard-core* que no contiene ningún suceso a distancia menor o igual que r y finalmente, $\gamma > 1$ da lugar a un *proceso de cluster o agregación*. En este último caso la constante α no es finita por lo que no podemos hablar de densidad en (2) como se señala en Kelly y Ripley (1976). En la *figura 2* se representan simulaciones de un proceso de Strauss bajo tres valores distintos del parámetro.

Una forma de encontrar un proceso cluster de Strauss es condicionando el proceso al número n de sucesos observados en X . El proceso condicional será estable. La verosimilitud (2) condicionada a n toma la forma $l_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = n! \gamma^{Y_n} C_n(\gamma)^{-1}$ siendo $C_n(\gamma)$ la constante normalizadora.

En realidad, un proceso de Strauss es un caso particular de una clase más general de procesos llamados *procesos puntuales de Gibbs Pairwise Interaction* (Ripley, 1977) los cuales vienen caracterizados por una densidad conjunta

$$(3) \quad l(s_1, \dots, s_n; \theta) = C^{-1} \beta^n \exp \left\{ - \sum_{i=1}^n \sum_{j>i} \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma) \right\} / n!$$

siendo $\|\cdot\|$ la distancia euclídea, $\Phi(\cdot)$ función potencial dependiente del parámetro $\theta = (\beta, \gamma)$, β el parámetro que determina la intensidad del proceso y C la constante normalizadora. Llamamos *energía potencial total* a $U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = \sum_{i=1}^n \sum_{j>i} \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma)$. A menudo se trabaja con $e(t) = \exp(-\Phi(t))$ llamada *función de interacción*. Se necesitan algunas restricciones en la forma de $\Phi(\cdot)$ para asegurar la finitud de la constante normalizadora C (Ripley, 1977; Baddeley y Moller, 1989).

En general, la *energía potencial total* para una configuración de n sucesos en (s_1, \dots, s_n) viene dada por

$$U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = \sum_{r=1}^n \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_r \leq n} \Phi_r(s_{i_1}, \dots, s_{i_r}; \gamma)$$

siendo $\Phi_r(\cdot)$ la *función potencial con interacciones de orden r*.

Normalmente sólo son considerados los términos de primer y segundo orden dando lugar a las potenciales para pares de sucesos de la forma

$$U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = \sum_{i=1}^n \Phi_1(s_i) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \Phi_2(s_i, s_j; \gamma).$$

En la práctica, $\Phi_1(\cdot)$ viene dado por la intensidad del proceso, β , y $\Phi_2(\cdot)$ suele denotarse por simplemente $\Phi(\cdot)$ (ver (3)).

Uno de los principios fundamentales de la mecánica estadística es que en un estado de equilibrio la densidad de probabilidad de una configuración particular es inversamente proporcional a la exponencial de la energía potencial. En términos de la densidad de Janossy,

$$j_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = C(\gamma) \exp(-\gamma U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma))$$

siendo $C(\cdot)$ una constante de proporcionalidad y γ el parámetro de la distribución. El mayor problema de este tipo de procesos reside en el cálculo de la constante C , elegida de forma que satisface:

$$[C(\gamma)]^{-1} = \int_{X^n} \exp(-\gamma U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma)) ds_1 \dots ds_n.$$

En el caso particular del proceso de Strauss la constante normalizadora C de (3) toma la expresión $C = \alpha(e^{-|X|} n!)^{-1}$ (ver (2)) y la función potencial de (3) viene dada por

$$(4) \quad \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma) = \begin{cases} -\log \gamma, & \text{si } \|s_i - s_j\| \leq r \\ 0, & \text{si } \|s_i - s_j\| > r. \end{cases}$$

3. ESTIMACIÓN DE LOS PARÁMETROS DEL MODELO

Aunque en la literatura (Cressie, 1991; Ogata-Tanemura, 1984; Penttinen, 1984 o Ripley, 1988) podemos encontrar tres métodos de estimación del modelo, máxima verosimilitud, pseudo-máxima verosimilitud y función K , en este trabajo nos concentramos ampliamente en el primero de ellos.

3.1. Estimación Máximo Verosímil

Supongamos que el proceso consiste en n sucesos con localizaciones s_1, s_2, \dots, s_n en una región acotada $X \subset \mathbb{R}^d$. La función de verosimilitud condicionada al número n de sucesos en A , densidad de Janossy condicionada, para un proceso puntual Gibbs Pairwise Interaction se obtiene a partir de (3)

$$(5) \quad l_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = \frac{n!}{C_n(\gamma)} \exp \left\{ - \sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma) \right\},$$

siendo la constante normalizadora,

$$(6) \quad C_n(\gamma) = \int_{X^n} \exp \left\{ - \sum \sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma) \right\} ds_1 \dots ds_n.$$

El estimador máximo verosímil $\hat{\gamma}$ de γ se obtiene maximizando (5). Se requiere por tanto evaluar la constante (6), pero habitualmente no puede evaluarse o es muy complicado pudiendo recurrir a aproximaciones.

Los estimadores obtenidos sin condicionar y condicionando el modelo son muy similares (Geyer y Moller, 1994) lo que nos permite elegir el procedimiento más conveniente. Veamos algunos *métodos* basados en aproximaciones de (6) que llamaremos de *estimación máxima verosímil aproximada*.

A) Método de Ogata y Tanemura

Ogata y Tanemura (1981) propusieron un método de aproximación de (6). Supongamos que los *sucesos del proceso puntual están distribuidos de forma dispersa y poco densa* de forma que las integrales cluster de órdenes superiores al tercero no proporcionan apenas información. Entonces la constante normalizadora es aproximadamente

$$C_n(\gamma) = (|X|^n) \left\{ 1 - \frac{b(\gamma)}{|X|} \right\}^{n(n-1)/2}$$

donde

$$b(\gamma) = \frac{d\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)} \int_0^\infty t^{d-1} \{1 - \exp(-\Phi(t; \gamma))\} dt.$$

Esta aproximación sólo es válida para procesos Gibbs *estables*, es decir, con constante normalizadora finita. Para procesos inestables las integrales cluster de órdenes mayores al tercero son importantes y no pueden obviarse.

- En el caso de un **proceso de Strauss**,

$$b(\gamma) = \pi(1-\gamma)r^2.$$

B) Método de Penttinen

Penttinen (1984) propuso un método basado en aproximaciones por Monte-Carlo mediante un algoritmo de Newton-Raphson. Supongamos que la función potencial $\Phi(\cdot)$ y la energía potencial total $U_n(\cdot)$ son dos veces diferenciables respecto de γ . Consideremos la función («score function»)

$$(7) \quad \beta(\gamma) = \partial \log\{l_n(\cdot; \gamma)\}/\partial \gamma = -\partial U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma)/\partial \gamma - \partial \log\{C_n(\gamma)\}/\partial \gamma.$$

Entonces, la media dada por

$$\bar{B}_T(\gamma) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \beta_t(\gamma; \phi_n(t)),$$

con $\beta_t(\gamma; \phi_n(t)) = -\partial U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma)/\partial \gamma + \partial U_n(\phi_n(t); \gamma)/\partial \gamma$, debe ser una buena aproximación a la score function (7). Sea $\Gamma(\gamma)$ la matriz cuadrada cuyo elemento (i, j) -ésimo es $\partial^2 \log\{l_n(\cdot; \gamma)\}/\partial \gamma_i \partial \gamma_j$. La matriz $\Gamma(\gamma)$ puede ser aproximada por

$$\bar{\Gamma}_T(\gamma) = \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T [\Gamma_t(\gamma; \phi_n(t))],$$

donde $\Gamma_t(\gamma; \phi_n(t))$ tiene como elemento (i, j) -ésimo la diferencia entre

$$\partial^2 U_n(\phi_n(t); \gamma)/\partial \gamma_i \partial \gamma_j - \partial^2 U_n(s_1, \dots, s_n; \gamma)/\partial \gamma_i \partial \gamma_j$$

y el elemento (i, j) -ésimo de

$$\{\beta_t(\gamma; \phi_n(t)) - \bar{B}_T(\gamma)\} \{\beta_t(\gamma; \phi_n(t)) - \bar{B}_T(\gamma)\)'.$$

El algoritmo de Newton-Raphson basado en Monte-Carlo, que arrancará con $\hat{\gamma} = \hat{\gamma}_0$, viene dado por

$$\hat{\gamma}_{k+1} = \hat{\gamma}_k - (\bar{\Gamma}_T(\hat{\gamma}_k))^{-1} \bar{B}_T(\hat{\gamma}_k)$$

para $k = 1, 2, \dots$, los procesos $\phi_n(1), \dots, \phi_n(T)$ son procesos de Gibbs simulados con parámetro $\hat{\gamma}_k$ y (s_1, \dots, s_n) es el proceso original.

A $\{\beta_t(\cdot), t = 1, \dots, T\}$ se le llama *proceso estocástico «efficient score»* y al valor medio $\bar{B}_T(\cdot)$ *estadístico «efficient score»*. Una buena aproximación al estimador máximo verosímil es aquella con \bar{B}_T próxima al 0. Una medida de la variación de este proceso estocástico viene dada por la varianza muestral $S_\beta^2 = 1/T \sum_{t=1}^T [\beta_t(\gamma; \phi_n(t)) - \bar{B}_T(\gamma)]^2$.

- En el caso de un **proceso de Strauss**, se tiene que

$$U_n(\phi_n(t); \gamma) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\| \cdot \|; \gamma) = -\log(\gamma^{Y_n})$$

y su derivada $\partial U_n(\cdot)/\partial \gamma = -Y_n/\gamma$. El estimador de la score function, estadístico efficient score, toma la forma $\bar{B}_T(\hat{\gamma}_k) = 1/T \sum_{t=1}^T (1/\hat{\gamma}_k)[Y_n^{emp} - Y_n(t)]$, donde *emp* hace referencia al patrón original empírico e $Y_n(t)$ al número de sucesos vecinos en el patrón simulado. Finalmente, $\partial^2 U_n(\cdot)/\partial \gamma^2 = Y_n/\gamma^2$, lo que da lugar a una forma sencilla de $\bar{\Gamma}_T(\gamma)$.

C) Método de las expansiones viriales

Otro método de aproximación de la constante normalizadora es via expansiones viriales. La aproximación viene dada por

$$n^{-1} \log(C_n) \approx (b_n/2) \int_{\mathbb{R}^2} f_{12} ds_2 + (b_n^2/4) \int_{\mathbb{R}^4} f_{12} f_{13} f_{23} ds_2 ds_3 \\ + (b_n^3/8) \int_{\mathbb{R}^6} (f_{12} f_{13} f_{14} f_{23} f_{24} f_{34} + 6 f_{12} f_{13} f_{14} f_{23} f_{24} + 3 f_{12} f_{14} f_{23} f_{34}) ds_2 ds_3 ds_4 \dots$$

siendo $b_n = n/|X|$ y $f_{ij} = \exp\{-\Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma)\} - 1$ (Ripley, 1988).

Esta aproximación es válida para procesos cercanos al Poisson en el sentido de que $\Phi(t)$ tiende rápidamente a 0 con el crecimiento de t. En particular, el rango de $\Phi(t)$ debe ser mucho menor que la media de las distancias entre sucesos. En principio estas expansiones pueden usarse para cualquier orden de integral pero su complejidad aumenta considerablemente con él, lo que limita su uso.

- En el caso del **proceso de Strauss** la expansión de cuarto orden es

$$\log(C_n) \approx -\pi n(n-1) \psi r^2 / (2|X|) - 0.2932516 \pi^2 n(n-1)(n-2) \psi^3 r^4 / (6|X|^2) \\ - \pi^3 n(n-1)(n-2)(n-3) \{-0.2743278 \psi^6 + 2.1854207 \psi^5 \\ - 1.3788611 \psi^4\} r^6 / (24|X|^3),$$

siendo $\psi = 1 - \gamma$.

4. ANÁLISIS DEL PATRÓN ESPACIAL DE LOS QUISTES EN EL ESTÓMAGO DE LA MARSOPA

Tal como ya se comentó en la introducción, tenemos que modelizar un proceso de agregación o cluster. Para ello podemos recurrir a un modelo de Strauss condicionando al número de sucesos observados, lo que nos lleva a una verosimilitud condicionada de la forma $l_n(\gamma) = n! \gamma^n C_n(\gamma)^{-1}$ con γ el parámetro a estimar.

La imagen digitalizada está formada por 512x512 pixels y la región en estudio, el estómago de la marsopa, tiene una superficie de $|X| = 56612$ pixels, lo que supone una superficie realtiva de 0.216.

La elección del parámetro de escala r viene dada por el sentido biológico de vecindad, se trata por tanto de un valor a determinar por los expertos en el problema. Al no disponer de una respuesta clara por parte de ellos, consideraremos diferentes valores de r . Una descripción del número de vecinos según el parámetro de escala viene dada en la *tabla 1*.

Tabla 1. Número de sucesos vecinos Y_n

Par. escala(r)	41	51.2	76.8	100	125	150
Y_n	5	9	23	30	38	41

Para la estimación del parámetro utilizamos el método de máxima verosimilitud aproximada. Consideramos las aproximaciones de Ogata y Tanemura (1981), el desarrollo en expansiones viriales y el método de Monte-Carlo sugerido por Penttinen (1984). Las aproximaciones a la constante normalizadora $C_n(\gamma)$ proporcionadas por los dos primeros métodos han sido obtenidas para un proceso de Strauss, por lo que maximizando la función de verosimilitud aproximada se han obtenido las estimaciones máximo-verosímiles (EMV) de la *tabla 2*.

Tabla 2. EMV bajo las aprox. de Ogata-Tanemura y Expansiones viriales

Par. escala(r)	Ogata-Tanemura	Expan. viriales
41	1.215	1.182
51.2	1.468	1.302
76.8	2.148	1.303
100	1.604	1.141
125	0.835	0.972
150	-2.04	0.796

Los resultados muestran estimaciones del parámetro superiores al 1 para aquellos parámetros de escala inferiores a $r = 125$ indicando una clara agregación en el patrón puntual. Para los valores de $r = 125$ y $r = 150$ las estimaciones no son tan reveladoras si bien ello puede ser debido a que con estos parámetros de escala prácticamente todos los sucesos son vecinos entre ellos, eliminándose así la posible exclusión de la verosimilitud por no vecindad. En cualquier caso, ambos métodos proporcionan estimaciones parecidas y coinciden con la tendencia de agregación del patrón puntual.

Las simulaciones necesarias en el método de Monte-Carlo propuesto por Penttinen (1984), han sido realizadas mediante el algoritmo de Ripley (1979). Se han considerado dos valores distintos como criterios de parada en el algoritmo de Newton-Raphson, $E = 0.01$ y $E = 0.005$ y otros dos valores distintos para T , número de iteraciones en Newton-Raphson para el cálculo de cada estimador $\hat{\gamma}$, $T = 25$ y $T = 1000$, por tratarse de valores de T extremos cuya influencia sobre los resultados que aparecen en la *tabla 3* queremos estudiar.

Tabla 3. EMV por Monte-Carlo: algoritmo de Newton-Raphson

Par. escala(r)	$T = 25$		$T = 1000$	
	E=0.01	E=0.005	E=0.01	E=0.005
41	1.236	1.236	1.259	1.259
51.2	1.352	1.361	1.388	1.399
76.8	1.461	1.461	1.472	1.472
100	1.442	1.442	1.424	1.424
125	1.546	1.546	1.580	1.580
150	1.681	1.681	1.701	1.679

Nuevamente los valores estimados son mayores que 1, confirmando la tendencia de agregación. Apenas hay diferencias entre ambos valores de E y entre los dos valores de T . Sin embargo, cabe señalar que la convergencia al EMV es mucho más rápida con $T=1000$ (sólo 3 iteraciones) que con $T=25$, para el que se necesitaron 23 iteraciones, consiguiéndose estimaciones ligeramente más eficientes para el primer valor de T . En la *tabla 4* se presenta una comparación del estadístico \bar{B}_T «efficient score» y de la variación del proceso estocástico del mismo nombre para $r = 41$, $T = 25$ y $T = 1000$ y en la *figura 3* se representan los procesos «efficient score» en las dos últimas iteraciones para ambos valores de T .

Tabla 4. Estudio con $r=41$ de la var. y estadístico effi. score para valores de T

Número de Iteración	$T = 1000$			$T = 25$			
	1	2	3	1	2	22	23
Varianza	3.44	4.38	4.12	3.24	5.41	3.63	3.59
Estadístico «effic. score»	1.219	-0.0071	0.101	0.72	0.236	-0.032	0.549

Los resultados anteriores nos dan una estimación para el parámetro que indica agregación espacial. La variación del valor del parámetro es debida a las diferencias entre unos y otros métodos que, recordemos una vez más, son métodos de aproximación. Ningún método es por sí solo concluyente y es conveniente utilizar varios de ellos como en este caso. Sin embargo, en la literatura el método de Penttinen es el más aplicado. La respuesta a los zoólogos debería ser que existe un mecanismo interno al estómago que produce una agregación espacial de los quistes en el mismo, pudiéndose predecir sus posiciones mediante un proceso cluster de Strauss. Como nota final decir que en este trabajo no se han considerado los tamaños de los quistes. Esto podría ser tratado desde el prisma de los procesos puntuales marcados.

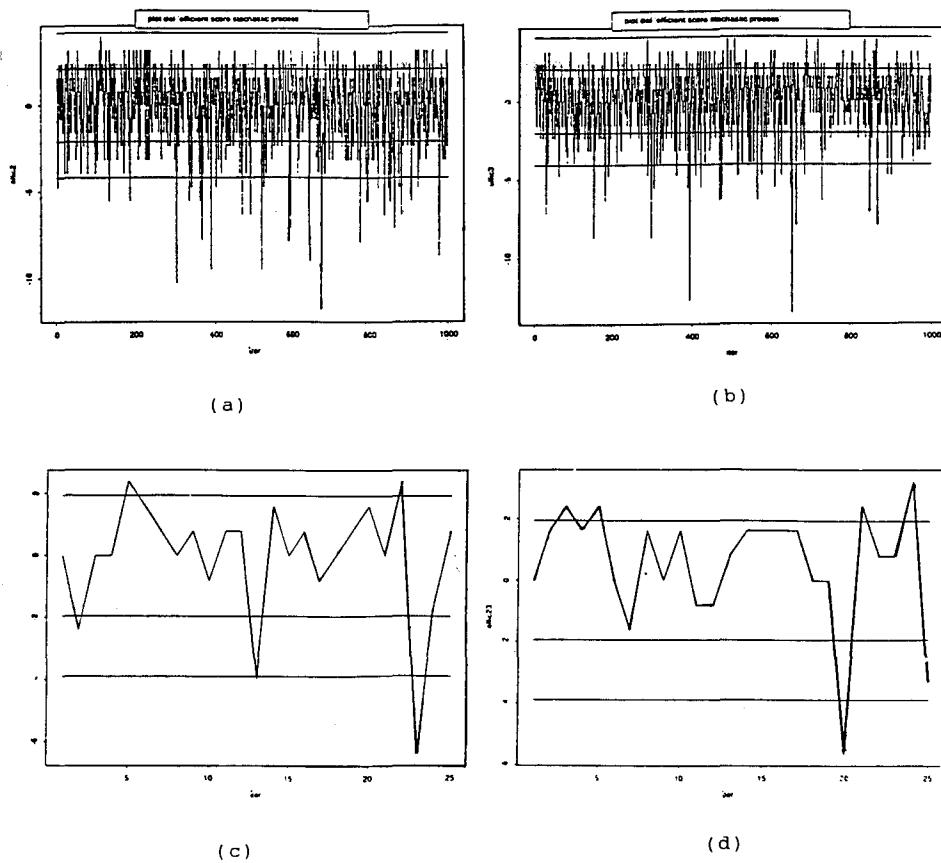


Figura 3. Proceso estocástico «efficient score»:

- (a) $T = 1000$, Iteración 2.
- (b) $T = 1000$, Iteración 3.
- (c) $T = 25$, Iteración 22.
- (d) $T = 25$, Iteración 23.

AGRADECIMIENTOS

Los autores quieren agradecer las sugerencias y comentarios del referee que han contribuido a la mejora del presente trabajo.

REFERENCIAS

- [1] **Baddeley, A.J. y Moller, J.** (1989). «Nearest neighbour Markov point processes and random sets». *International Statistical Review*, **57**, 2, 89-121.
- [2] **Balaguer, A., Mateu, J. y Montes, F.** (1992). «Análisis de la distribución espacial de quistes en el estómago de la marsopa». *XX Congreso de la SEIO*, Cáceres, España.
- [3] **Cox, D.R. y Isham, V.** (1980). *Point Processes*. Chapman and Hall, London.
- [4] **Cressie, N.A.C.** (1991). *Statistics for Spatial Data*. Wiley, New York.
- [5] **Daley, D.J. y Vere-Jones, D.** (1988). *Introduction to the theory of point processes*. Springer, New York.
- [6] **Geyer, C.J. y Moller, J.** (1994). «Simulation and likelihood inference for spatial point processes». *Scand. Journal of Statistics*. (Por aparecer)
- [7] **Janossy, L.** (1950). «On the absorption of a nucleon cascade». *Proc. R. Irish Acad. Sci. Sec. A*, **53**, 181-188.
- [8] **Kelly, F.P. y Ripley, B.D.** (1976). «A note on Strauss model for clustering». *Biometrika*, **63**, 357-360.
- [9] **Mateu, J. y Montes, F.** (1994). «Modelling pairwise interaction point processes». *9th International Workshop on Statistical Modelling*. Exeter, UK.
- [10] **Mateu, J., Usó, J.L., Montes, F. y Antolín, C.** (1995). «Analysis of a bivariate spatial point pattern in Forest vegetation». *Advances in Ecosystems Research*, **2**, 67-71.
- [11] **Moyal, J.E.** (1962). «The general theory of stochastic population processes». *Acta Mathematica*, **108**, 1-31.
- [12] **Ogata, Y. y Tanemura, M.** (1981). «Estimation of interaction potentials of spatial point patterns through the maximum likelihood procedure». *Ann. Inst. Statist. Math. B*, **33**, 315-338.
- [13] **Ogata, Y. y Tanemura, M.** (1984). «Likelihood analysis of spatial point patterns». *Journal of the Royal Statistical Society B*, **46**, 496-518.
- [14] **Penttinen, A.** (1984). «Modelling interaction in spatial point patterns: Parameter estimation by the maximum likelihood method». *Jyväskylä Studies in Computer Science, Economics and Statistics*, **7**, 1-105.
- [15] **Ripley, B.D.** (1977). «Modelling spatial patterns (with discussion)». *Journal of the Royal Statistical Society, B*, **39**, 172-212.

- [16] **Ripley, B.D.** (1979). «Simulating spatial patterns: Dependent samples from a multivariate density». *Journal of the Royal Statistical Society C*, **28**, 109-112.
- [17] **Ripley, B.D.** (1988). *Statistical inference for spatial processes*. Cambridge University Press, Cambridge, UK.
- [18] **Strauss, D.J.** (1975). «A model for clustering». *Biometrika*, **62**, 467-475.

ENGLISH SUMMARY

MODELLING THE SPATIAL DISTRIBUTION OF CYSTS PLACED IN A PORPOISE STOMACH USING A GIBBS PROCESS*

JORGE MATEU**

FRANCISCO MONTES*

The Poisson process can be generalized in many directions. The approach suggested here is first to specify the distribution of the total number N of points and then, given N , to specify the joint distribution of the N points over the region. Such finite point processes arise naturally as models for populations of animals, insects and plants in the ecological field and as models for particle processes in physics.

A fundamental class of finite point processes arising in statistical physics is described by means of forces acting on and between particles. The total potential energy corresponding to a given configuration of particles is assumed to be decomposable into terms representing the interactions between the particles. Such point processes are called Gibbs processes. A particular Gibbs process, the Strauss point process, based only on the number of neighbour pairs of points, is developed.

The paper finishes up with an application to model the spatial pattern of some biological data.

Keywords: Finite point processes, interactions, potential function, Strauss process.

* This work is partly supported by the help of Generalitat Valenciana GV-2221-94 and Fundació Bancaixa PIA94-25.

* Jorge Mateu. Departamento de Matemáticas de la Universitat Jaume I. 12071 Castellón.

** Francisco Montes. Departamento de Estadística e I.O. de la Universitat de València. 46100 Burjassot. València.

- Received May 1996.

- Accepted September 1997.

The Poisson process can be generalized in many directions. In this paper it is examined the generalization in the sense that, for a Poisson process, conditional on the total number of points in a bounded region of time or space, the individual points can be treated as independently and identically distributed over the region. This prompts an alternative approach to specifying the structure of point processes in a bounded domain or, more generally, of any point process in which the total number of points is finite with probability 1. Such a process is called a *finite point process*.

The approach suggested is first to specify the distribution of the total number N of points and then, given N , to specify the joint distribution of the N points over the region. Such finite point processes arise naturally as models for populations of animals, insects and plants in the ecological field and as models for particle processes in physics. To define and simulate a finite point process, let's suppose that the following conditions hold: (a) The points are located in a complete separable metric space X , as, for example, $X = \mathbb{R}^d$. (b) A distribution $\{p_n\}$ ($n = 0, 1, \dots$) is given determining the total number of points in the population, with $\sum_{n=0}^{\infty} p_n = 1$. (c) For each integer $n \geq 1$, a probability distribution $\Pi_n(\cdot)$ is given on the Borel sets of $X^n = X \times \dots \times X$, and it determines the joint distribution of the positions of the points of the process, given that their total number is n .

A fundamental class of point processes arising in statistical physics is described by means of forces acting on and between particles. The total potential energy corresponding to a given configuration of particles is assumed to be decomposable into terms representing the interactions between the particles. Such point processes are called *Gibbs processes*. A particular Gibbs process, the *Strauss point process*, based only on the number of neighbour pairs of points (or events), is developed.

Conditional on n , the likelihood function for a Gibbs model is of the form

$$l_n(s_1, \dots, s_n; \gamma) = \frac{n!}{C_n(\gamma)} \exp \left\{ - \sum \sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma) \right\}$$

where the normalizing constant is

$$(1) \quad C_n(\gamma) = \int_{X^n} \exp \left\{ - \sum \sum_{1 \leq i < j \leq n} \Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma) \right\} ds_1 \cdots ds_n.$$

Maximum likelihood estimation of γ requires the evaluation of (1). Although it is not usually obtainable in closed form, approximate expressions are sometimes available. Ogata-Tanemura (1981) used the cluster-expansion method of statistical mechanics to obtain an approximation of (1). Using up to the second-order cluster integral, the normalizing constant is approximately

$$C_n(\gamma) = (|X|^n) \left\{ 1 - \frac{b(\gamma)}{|X|} \right\}^{n(n-1)/2}$$

where

$$b(\gamma) = \frac{d\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)} \int_0^\infty t^{d-1} \{1 - \exp(-\Phi(t; \gamma))\} dt.$$

Pentinen (1984) suggests a Newton-Raphson-type algorithm for solving the m.l. estimating equation

$$\hat{\gamma}_{k+1} = \hat{\gamma}_k - (\bar{\Gamma}_T(\hat{\gamma}_k))^{-1} \bar{B}_T(\hat{\gamma}_k)$$

where $\bar{B}_T(\theta)$ and $\bar{\Gamma}_T(\theta)$ are given in Section 3.1. Finally, it is studied another method based on virial expansions. The approximation consists of

$$\begin{aligned} n^{-1} \log(C_n) &\approx (b_n/2) \int_{\mathbb{R}^2} f_{12} ds_2 + (b_n^2/4) \int_{\mathbb{R}^4} f_{12} f_{13} f_{23} ds_2 ds_3 \\ &+ (b_n^3/8) \int_{\mathbb{R}^6} (f_{12} f_{13} f_{14} f_{23} f_{24} f_{34} + 6f_{12} f_{13} f_{14} f_{23} f_{24} + 3f_{12} f_{14} f_{23} f_{34}) ds_2 ds_3 ds_4 \dots \end{aligned}$$

where $b_n = n/|X|$ and $f_{ij} = \exp\{-\Phi(\|s_i - s_j\|; \gamma)\} - 1$ (Ripley, 1988).

The paper finishes up with an application of these theoretical techniques to model the spatial pattern of some biological data.

Secció Docent i Problemes

SECCIÓ DOCENT I PROBLEMES

La «Secció docent i problemes» té l'objectiu de publicar articles de caire docent, difícilment publicables en revistes de recerca. A cada número de *Qüestiió* s'inclouen d'un a tres problemes i les solucions es donen en el número següent.

Els lectors poden proposar problemes amb les solucions pertinents i enviar-los a *Qüestiió*, que farà una selecció i en publicarà els més adequats, fent la corresponent referència a l'autor.

També seran ben rebudes solucions alternatives a les propostes fetes per l'autor dels problemes. L'editorial es reservarà, però, el dret a publicar-les.

SOLUCIONS ALS PROBLEMES PROPOSATS AL VOLUM 21 N. 3

PROBLEMA N. 66

1. $\mathbf{a} = \beta P\mathbf{b}$ y $\mathbf{b} = \beta Q\mathbf{a}$ implican

$$\mathbf{a} = \beta^2 PQ\mathbf{a}$$

que demuestra que \mathbf{a} es un vector propio de PQ de valor propio $\lambda = 1/\beta^2$.

2. Si $\mathbf{1}_p, \mathbf{1}_q$ son vectores columnas de unos, entonces

$$Q\mathbf{1}_p = \mathbf{1}_q \quad P\mathbf{1}_q = \mathbf{1}_p$$

como consecuencia de que las filas de P y Q son vectores de probabilidad (suman 1). Por tanto

$$PQ\mathbf{1}_p = P\mathbf{1}_q = \mathbf{1}_p$$

y las filas de PQ son también vectores de probabilidad.

Luego $\mathbf{1}_p = (1, \dots, 1)'$ es vector propio de PQ de valor propio $\lambda = 1$.

3. Indiquemos $C = PQ = (c_{ij})$, $C^n = (c_{ij}(n))$. Si $V = (v_1, \dots, v_p)'$ es vector propio de C de valor propio λ , entonces

$$CV = \lambda V \Rightarrow C^n V = \lambda^n V$$

Indiquemos $C^n V = (w_1, \dots, w_p)'$. Entonces $w_i = \lambda^n v_i$ y

$$w_i = \sum_{j=1}^p c_{ij}(n) v_j$$

C^n es una matriz cuyas filas son también vectores de probabilidad. Luego

$$|w_i| \leq \sum_{j=1}^p c_{ij}(n) |v_j| = \sum_{j=1}^p |v_j|$$

Así $|w_i|$ está acotado. Pero $|w_i| = \lambda^n |v_i|$. Si $\lambda > 1$, tendríamos que $|w_i| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$, contradiciendo la acotación de $|w_i|$. Esto prueba que $0 \leq \lambda \leq 1$.

C.M. Cuadras
Universitat de Barcelona

PROBLEMA N. 67

Consideremos la función pámétrica $\Psi(x, \theta)$

$$\Psi(x, \theta) = P(X \leq x) = F_\theta(x)$$

Un estimador insesgado de $\Psi(x, \theta)$ a partir de una muestra x_1 es la variable Bernouilli

$$\hat{\Psi}(x, \theta) = \begin{cases} 1 & \text{si } x_1 \leq x, \\ 0 & \text{si } x_1 > x, \end{cases}$$

cuya varianza es $F_\theta(x)(1 - F_\theta(x))$.

Aplicando la desigualdad de Cramer-Rao

$$F_\theta(x)(1 - F_\theta(x)) \geq \frac{\left(\frac{\partial}{\partial \theta} F_\theta(x)\right)^2}{I(\theta)}$$

Pero para todo x

$$\frac{1}{4} \geq F_\theta(x)(1 - F_\theta(x))$$

así que

$$\frac{1}{4} \geq \frac{\left(\frac{\partial}{\partial \theta} F_\theta(x)\right)^2}{I(\theta)}$$

que es equivalente a $I(\theta) \geq 4 \left(\frac{\partial}{\partial \theta} F_\theta(x)\right)^2$ y esta desigualdad se cumple uniformemente en x .

C.M. Cuadras
Universitat de Barcelona

PROBLEMES PROPOSATS

PROBLEMA N. 68

Un comerciant viatja diàriament a Barcelona (B), Girona (G) i Tarragona (T). Si un dia està a B, la probabilitat de que l'endemà viatgi a G és 0.3 i a T és 0.2. Si està a G, la probabilitat de que l'endemà segueixi a G és 0.5 i la de que viatgi a B és també 0.5. Si un dia està a T la probabilitat de que l'endemà continuï a T és 0.5 i de que viatgi a B és 0.5.

- 1) Si un dilluns està a B, calculeu la probilitat de que el dimecres estigui a G.
- 2) L'empresa destina anualment 1 milió de ptes al viatjant per a despeses d'estada a B, G i T, però li demana que faci un pressupost. Calculeu aquest pressupost repartint el milió en despeses previstes a B, G i T.

C.M. Cuadras
Universitat de Barcelona

PROBLEMA N. 69

Siguin, a cada punt geogràfic del mar, X i T la nebulositat del cel i la temperatura del mar. Suposem que X és una variable aleatòria uniforme amb densitat $f(x) = 1$, $0 < x < 1$. La funció de densitat de probabilitat de T és $g(t)$ i les variables X i T són estocàsticament independents. La temperatura Y que un satèl·lit artificial mesura sobre cada punt del mar és $Y = T(1 - X)$. Cal notar que només són observables les variables X i Y .

- 1) Calcula la mitjana $\mu(T)$ en funció de $\mu(Y)$.
- 2) Si la distribució de T és exponencial negativa amb paràmetre $\alpha = 1$, troba la densitat bivariant de (X, Y) .

C.M. Cuadras
Universitat de Barcelona

**Cursos i congressos
d'estadística**



The TES Institute Training of European Statisticians

TES OR THE ENHANCEMENT OF STATISTICS

The TES Institute is a non-profit association created in November 1996 by the Directors General of the National Statistical Institutes of ten Member States of the European Union and of the four Member States of the European Free Trade Association.

As an international post-graduate vocational training institute for statisticians, the mission of the TES Institute is to create truly European vocational training and staff development opportunities at post-graduate level. The annual training programmes are designed for target groups ranging from young statisticians to executives of National Statistical Institutes.

Over the last five years, the objectives of the TES Institute were (*a*) to provide training courses and seminars of short duration at post-graduate level, thus offering statisticians opportunities to perfect their skills, (*b*) to provide a forum for mutual consultation on vocational training for statisticians, (*c*) to give assistance in the training for new European statistical projects, thus disseminating standards, European methods and classifications, and to help future members to prepare for their integration into the European Statistical System, and (*d*) to promote exchanges of skills and experiences.

TYPES OF TRAINING

The TES Institute offers two types of training: the *Core Programme* and the *Special Courses Programme*. Both of them are covering the following specialisation areas:

(1) *Data Collection and Survey Methodology*, (2) *Economic Statistics*, (3) *Social Statistics* and (4) *Publication, Dissemination and Use of Statistics*, complemented by the *Common Courses* (general «statistical» culture) and the *Support Courses* (statistical analysis, computing techniques and statistical management).

The Core Programme

The annual training programmes are designed for public sector statisticians in the Member States of the EU and EFTA. However, the programmes are also open to the National Statistical Institutes of countries in Central and Eastern Europe, the Mediterranean Basin, some other selected countries and private sector statisticians.

The leading principle for the definition of the annual programmes and the detailed content of each of the courses is that choices are made on the basis of the training needs in the Member States of the EU and the EFTA. The *Core Programme* is subsidised by the Statistical Office of European Commission (Eurostat).

The Special Courses Programme

The *Special Courses Programme* is designed for public sector statisticians from countries outside the EU and the EFTA. At this moment its main clients are statisticians from the Central European countries and the countries of the Mediterranean Basin. The *Special Courses Programme* is not subsidised.

The *Special Courses Programme* consists of courses which are either repeats of existing courses in the *Core Programme* or tailor-made courses at the request of a country or a group of countries. Whenever a course from the *Core Programme* is repeated, the content is reviewed and adapted to the specific needs of the participants.

TRAINING ORGANISATION

Obviously, vocational training programmes of this kind imply the involvement of different groups of people.

- The training staff of the TES courses consists of *an international pool of trainers* (highly qualified practitioners and university professors). This pool is responsible for the design and the execution of the courses and the development of the course material, which are annually reassessed and updated where necessary. Each year the organisation of the programme requires the intervention of about hundred trainers.

- The National Statistical Institutes of the European Union (EU), the European Free Trade Association (EFTA), the Central and Eastern European Countries (ECO¹) and the Mediterranean Basin countries² have nominated *TES Correspondents* for the TES programme. This network of TES Correspondents is responsible for the communication between their Institute and the TES Institute, for the co-ordination of the registration of candidates and for the dissemination of information about TES courses.
- The main task of the staff of the TES Institute is to assist in the design, to organise and to give logistic support to the international vocational training programme and to provide information about existing training possibilities in the various countries in Europe. To carry out these activities, the TES Institute comprises a permanent team of eleven people.

CURRENT ACTIVITIES

Training Core and Special Courses Programmes

Over the last five years, the TES Institute organised some 110 courses in the framework of the *Core Programme* open to EU, EFTA and ECO statisticians. Besides, *Special Courses* have also been organised especially for statisticians from ECO countries.

On the whole, about 600 participants have been trained every year through these two kinds of training programme.

Moreover, since 21st May 1997, when the first Eurostat *Task Force on Training* for MEDSTAT countries was organised, the TES Institute officially extended its training activities to the Mediterranean Basin countries.

Ad hoc projects

Recently, a seminar on «Education Statistics» has been organised at the request of Eurostat (Vienna, January 1998).

Moreover, two ad hoc courses (5 days) for the statistical service of Malta: the course «Enterprise Statistics» and the course «National Accounts Statistics in Practice». Both courses were executed end 1997.

¹Albania, Bulgaria, Czech Republic, Estonia, Hungary, FYROM (Former Yugoslav Republic of Macedonia), Latvia, Lithuania, Poland, Romania, Slovakia and Slovenia.

²Algeria, Cyprus, Egypt, Israel, Jordan, Lebanon, Malta, Morocco, Palestine, Syria, Tunisia, Turkey.

In a near future, the TES Institute will carry out:

- Two seminars on «Statistics and Policy Making» at the request of the Palestinian Statistical Training Centre (Gaza, Westbank). These seminars will be financed through UN funds and are carried out in co-operation with UNITAR, the UN Institute for Training and Research, Geneva. Again this seminar may be introduced, in a modified form, in the future regular programme.
- The first part of a «Summer School on Social Statistics» in July 1998 ($5\frac{1}{2}$ days) in Siena. The other two parts are planned for summer 1999 and 2000.
- Specific training will be provided to statisticians from the Ukrainian Statistical Office. The training will cover *Business Registers, Enterprise Statistics and National Accounts*.

Consulting

Apart from the well-known training activities, the TES Institute has recently set up a procedure for consulting activities.

In this context, the TES Institute is requested to provide support to the set-up of a training centre for statisticians in a specific country in Ukraine. This support will consist of (a) training of future trainers, as above mentioned and (b) consulting for curriculum development for their future training programmes.

Publication

Articles The TES Institute is regularly publishing articles on its current activities in periodic Newsletter of several Statistical Institutes and some statistical journals (as «Quaderns d'Estadística i Investigació Operativa» (*Qüestió*), edited by the Institut d'Estadística de Catalunya).

Manuals

The TES Institute decided to set up a TES Manual series for the manuals to be developed in the specialisation areas covered by the vocational training programme (i.e. *Data Collection and Survey Methodology, Economic Statistics, Social Statistics and Publication, Dissemination and Use of Statistics*).

By the end of this year, the following publications will be available at the TES Institute:

- «*Introduction to Demographic Data Analysis*» by Mr Otto Andersen from Statistics Denmark. This manual will cover subjects like: data in demography, lexis diagram, fertility, mortality, etc. As the manual will be available at the TES Institute.

- «*Index Number Theory and Practice*» by Prof. Marco Martini from the University of Milano.

Please inform the TES Institute if you are interested in the above mentioned publications (articles and/or manuals) and detailed information will be forwarded to you.

GENERAL INFORMATION

For further information about courses, new brochure, publications, specific projects and so on, please contact Ms Valérie Vandewalle:

by phone:	+352/29 85 85 34
fax:	+352/29 85 29/30
e-mail:	vandewalle@tes-institute.lu
website:	http://www.restena.lu/tes.institute
for mail:	5, rue Guillaume Kroll L - 1882 Luxembourg

ANNEX

The courses to be organised between April and June 1998 in the framework of the *Core Programme* are listed below:

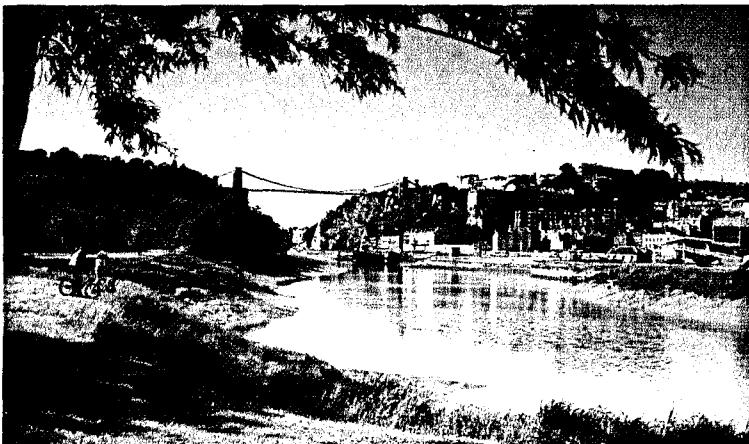
- From 6 to 8 April, Mr Stelluto (Bureau of Census - USA) will present the Construction and Use of the Employment Cost Index. The course will be provided in English in Barcelona.
- From 20 to 23 April, the TES Institute will host the course of Mr Barnabé (Statistics Canada) on *Planning and Management of Statistical Programmes*.
- The course on *Notions of Sampling and Survey for Managers* will be given in French by Prof. Droebeke in the premises of the Belgian National Statistical Institute from 27 to 29 April. (Not included in the overview published in *Qüestio*, vol. 21, num. 3.)
- *The Variance Estimation and Discrete Data Analysis for Complex Surveys* will be presented by Mr Lehtonen (Statistics Finland) from 4 to 6 May. It will take place within the Finnish Statistical Office.
- The course on *Nomenclatures, Classifications and their Harmonisation* will be given in English by Mr Langkjaer (Eurostat) in the premises of the TES Institute from 4 to 8 May.

- Mr Glätsel (Eurostat) will present the *Revised European System of Accounts* (ESA 95) - Financial Accounts from 11 to 13 May in the premises of the TES Institute in Luxembourg. (Not included in the overview published in *Qüestiió*, vol. 21, num. 3.)
- From 25 to 29 May, Prof. von der Lippe (University of Essen) will present the main concepts of *Price Index Theory and Price Statistics*. The course will be organised in Düsseldorf and presented in English.
- Prof. Smith (University of Southampton) will give a course on *Sampling Techniques and Practice* in Southampton from 1st to 12 June.
- Mr Lyberg (Statistics Sweden) will present in English how to *Deal with Non Response*. The course will be organised in Stockholm from 8 to 12 June.
- Mr Domergue (INSEE) will present in French the main concepts of *National Accounts Statistics in Practice* from 15 June to 26 June in Paris.
- Mr Carlsen will present in English *The Set-up and Operation of Data-Shop and Marketing of Statistical Services* in the premises of Statistics Denmark from 15 to 19 June.
- From 15 to 19 June, Mr Bergstrøm (Statistics Norway) will present the *Set-up, Use and Maintenance of Business Registers*. The course will be provided in English in Oslo. (Not included in the overview published in *Qüestiió*, vol. 21, num. 3.)
- From 16 to 19 June, the TES Institute will host the course of Mr Müller on *The European Labour Force Survey*.
- *Statistical Presentation with Graphic Software* will be treated by Mr Wallgren (Statistics Sweden) from 22 to 24 June. It will take place within the Swedish Statistical Office.
- The course on the *Application of the Blaise System* will be organised at the end of the academic year (details about this course will be provided later).

XIII COMPSTAT conference of the International Association for Statistical Computing

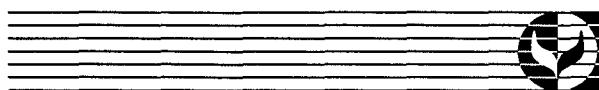


Compstat '98



**24-28 August 1998
Bristol, England**

Preliminary Programme



IACR-Rothamsted University of Bristol University of Bath
Long Ashton Department of Mathematics

Compstat '98



INTRODUCTION

Statistical computing provides the link between statistical theory and applied statistics. COMPSTAT'98 will range over all aspects of this link, from development and implementation of new computer-based statistical methodology to innovative applications and software evaluation. The conference will appeal to anyone using computers in statistics, whether in universities, industrial companies, research institutes or as software developers.

The conference is organised by IACR-Rothamsted, IACR-Long Ashton, the University of Bristol Department of Mathematics and the University of Bath Department of Mathematical Sciences. We have a strong involvement in statistical computing and a long association with COMPSTAT, and look forward to welcoming you to a stimulating and enjoyable conference.

Compstat '98

SCIENTIFIC PROGRAMME

The conference will present an extensive programme of invited and contributed papers, covering the following topics.

C1: Statistical Research – development of statistical methodology, especially topics that rely on computers and computing environments.

C2: Computing – contributions of computer algorithms, tools and environments to the practice of statistics.

C3: Applied Statistics – innovative applications of statistical computing in any area of current interest.

The conference proceedings will be published in two volumes, ready for each (full) participant to be given a copy at the start of the conference. Volume 1, published by Springer Verlag, contains the refereed Full Contributions and the Invited Papers. Volume 2, published by IACR– Rothamsted and University of Bristol, contains the Short Communications and Posters. The current content of the invited programme is listed below.

INVITED SPEAKERS

Brian Cullis (Australia)

Analysis of spatially correlated data

Krystof Eben (Czech Republic)

Mortality pattern prediction in worker cohorts

John Eccleston (Australia)

Computational issues in the design of experiments for correlated data

Heikki Mannila (Finland)

Data mining and hierarchical models

Jacqueline Meulman (Netherlands)

Optimal scoring methods for graphical multivariate data analysis

Geert Molenberghs (Belgium)

The analysis of multivariate clustered binary data from developmental toxicity experiments

Marlene Müller (Germany)

Interactive teaching of statistics

Florence Muri (France)

Modelling bacterial genomes using hidden Markov models

Christian Robert (France)

Bayesian and likelihood inferences for latent variable models

Roberta Siciliano (Italy)

Exploratory versus decision trees

Bernard Silverman (United Kingdom)

Wavelets in statistics: some recent developments

Dag Tjøstheim (Norway)

Exploring time series using semi- and nonparametric methods

Mariano Valderrama (Spain)

Time series forecasting by functional principal component methods

Compstat '98

LOCAL INFORMATION

Bristol is an attractive city in the South-West of England. It is set in pleasant surroundings and contains a wide range of sites of historic interest ranging from St Mary Redcliffe Church ("the fairest, the goodliest and most famous parish church in the Kingdom" according to Queen Elizabeth I in 1574) and Bristol Cathedral, to the SS Great Britain (one of the original iron ships) and the Clifton suspension bridge. The Arts are well represented with the Theatre Royal (the oldest theatre in England), a fine City Museum and Art Gallery, concert halls and the Arnolfini Complex for contemporary visual arts, music, dance and cinema. The conference is based at the University of Bristol's academic and administrative campus situated within easy walking distance of the city centre and attractive historical areas such as Clifton, with their shops, cafés and night clubs!

TRAVEL ADVICE

Bristol has excellent connections by train and road to the rest of the United Kingdom or, via Eurotunnel, to Europe as a whole. The most convenient railway station is Bristol Temple Meads, in the centre of Bristol, which is about 2 km from the University campus and about 5 km from the Stoke Bishop accommodation. There are usually plenty of taxis, but we will also provide car transport from the station to Stoke Bishop for those arriving on Sunday afternoon. There is an hourly train service taking about 1hr 45minutes between Bristol and London (Paddington Station). The trains stop at Reading, for coach connections to London Heathrow Airport. There are also trains from London Gatwick to Reading. Bristol has its own airport situated about 12 km to the south west of the city, with flights to and from many leading European cities.

Compstat '98

ACCOMMODATION

The official conference accommodation will be in single study bedrooms in the University of Bristol Halls of Residence, situated in a park and woodland setting in the area of Stoke Bishop, about 5 km to the north of the city centre and 3 km from the academic campus. There are 280 rooms with ensuite facilities available at the cost of £37 per night (bed and breakfast). There are also a number of standard rooms with washbasin, but shared bath and toilet facilities, at a lower cost of £22 per night (bed & breakfast). There will be a courtesy coach service to transport participants between Stoke Bishop and the academic campus at the beginning and end of the scientific programme each day, and to and from all the social events. Alternatively, a hotel list is available by post or on the World Wide Web if you wish to make your own arrangements. We regret that disabled participants will need accompanying helpers, as access to the academic campus and to the Halls involves climbing flights of steps.

MEALS

Buffet lunches will be available at the University, with a vegetarian option, for all five days of the conference at an inclusive price of £44 (a packed lunch will be available for those taking lunches and wishing to join the walking tour to the Brecon Beacons on Wednesday). The Conference Dinner, on Thursday 27 August in the Victoria Rooms, Clifton will cost £30. A self-service dinner can be booked at the Halls of Residence on 23 August at a cost of £10:

Compstat '98

SOCIAL PROGRAMME

There will be a full programme of social events to allow participants to meet friends, exchange ideas and see many of the local attractions.

Sunday 23 August

Informal get-together at the Halls of Residence

Monday 24 August

Reception by Bristol City Council at The Council House

Tuesday 25 August

Organ recital and self-guided tour at St Mary Redcliffe Church

Wednesday 26 August

A choice of excursions:

1. Tour to Avebury, Stonehenge and Salisbury
2. Tour to Cheddar, Glastonbury and Wells
3. Visit to the City of Bath and Roman Baths
4. Tour of the Bristol Docks area, including boat trip and visit to the SS Great Britain
5. Strenuous walk in the Brecon Beacon hills

Thursday 27 August

Conference dinner in the Victoria Rooms, Clifton

Compstat '98

REGISTRATION FEES

	Until 9 April	Until 24 June	After 24 June
ISI/IASC member	£160	£190	£220
Others	£190	£220	£250
Accompanying person	£40	£40	£40

There is also a student rate, available on application supported by a letter from your Head of Department.

The fee includes:

- the proceedings
- attendance at all scientific sessions, poster, book and software exhibitions,
- participation in the social programme (excluding excursions and conference dinner)
- refreshments during morning and afternoon breaks

Meals, conference dinner and accommodation will be charged for separately, and a charge of £10 will be made for excursions. Cancellation will incur a charge of £30 up to 26 April, £60 up to 24 June; no refund can be made after 24 June.

FURTHER INFORMATION

Up-to-date information about the conference, and the Bristol locality, will be maintained on our Web site:
<http://www.stats.bris.ac.uk/COMPSTAT/>

Compstat '98

SCIENTIFIC PROGRAMME COMMITTEE

Roger Payne (United Kingdom), Chair
Jaromír Antoch (Czech Republic)
Gianfranco Galmacci (Italy)
Peter Green (United Kingdom)
Wolfgang Härdle (Germany)
Peter van der Heijden (Netherlands)
Albert Prat (Spain)
Jean Pierre Raoult (France)
Mats Rudemo (Sweden)

CONSULTATIVE MEMBERS:

ASC – Andrew Westlake (United Kingdom)
ERS IASC – Antoine de Falguerolles (France)
EARS IASC – Chooichiro Asano (Japan)
EUROSTAT – Christian Guittet
(Luxembourg)
IASC – Malcolm Hudson (Australia)
INTERFACE – Carey Priebe (USA)

ADDRESS FOR CORRESPONDENCE

COMPSTAT'98
c/o G.M. Arnold,
IACR – Long Ashton Research Station,
Department of Agricultural Sciences,
University of Bristol,
Long Ashton,
Bristol BS41 9AF, UK
Fax: +44 1275 394007
Email: compstat-98@bristol.ac.uk

Information is also available
on the World Wide Web:
<http://www.stats.bris.ac.uk/COMPSTAT/>

LOCAL ORGANISING COMMITTEE

Roger Payne (IACR-Rothamsted) Chair
Peter Lane (IACR-Rothamsted)
Peter Green (University of Bristol)
Steve Brooks (University of Bristol)
Gillian Arnold (IACR-Long Ashton)
Phil Brain (IACR-Long Ashton)
Stuart Barber (University of Bath)
Andrew Wood (University of Bath)

Novetats de Software

NOVETATS DE SOFTWARE

La secció «Novetats de software» té la finalitat de promoure l'intercanvi d'informació relacionada amb programes d'ordinador disponibles, destinats a la implementació de metodologia estadística o investigació operativa.

A causa de l'important creixement que ha experimentat la utilització dels ordinadors en totes les àrees científiques i tècniques, i a les esmentades més amunt, en particular, hi ha un bon nombre d'investigadors que han desenvolupat programaris propis, l'existència dels quals és desconeguda, de vegades, per molts lectors que els podrien aprofitar. Per això, creiem que és convenient i útil donar-los a conèixer mitjançant *Qüestiió*, amb el benentès que només actuaria com a mitjà de difusió.

Amb tota certesa, la vostra col·laboració serà d'utilitat per a molts lectors als qui facilitarà el treball i, alhora, aquests podran ajudar els autors del programes suggerint-los possibles millores.

SPAD, UN SISTEMA DE EXPLORACIÓN MULTIVARIANTE DE DATOS

TOMÀS ALUJA-BANET

Dpto. de Estadística e Investigación Operativa
Universitat Politècnica de Catalunya

SPAD es un sistema estadístico para el tratamiento exploratorio multivariante de grandes tablas de datos.

SPAD es un sistema que remonta a los trabajos pioneros de L. Lebart y A. Morineau a lo largo de una treintena de años y cuenta como fundamento la base científica reflejada en varias publicaciones (Dunod, 1977, Dunod 1979, Wiley 1984, Marcombo 1985, Dunod 1995). La concepción del sistema ha ido pareja a su práctica en el tratamiento de datos de encuesta¹.

En la actualidad SPAD está desarrollado por la sociedad CISIA (Centre International de Statistique et Informatique Appliquées) y su uso está ampliamente difundido en el entorno francés, tanto en las universidades como en las empresas privadas.

SPAD implementa la estrategia de análisis de datos propia de la escuela francesa, basada en «aprender directamente de los datos», o también pasar de los datos en forma tabular a una representación visual de los datos «informativa» para el usuario. En este sentido, el desarrollo de esta filosofía es deudora del avance informático: el hecho de disponer de enormes bases de datos almacenadas, el hecho de que «ahora» es posible tratar toda la población y no solamente una muestra (aleatoriedad por supuesto), el hecho de disponer de pantallas de alta resolución permitiendo una presentación gráfica interactiva y de alta calidad, pone de actualidad lo que de una forma más global se conoce como *data mining*, punto de encuentro de los sistemas de bases de datos, la estadística y los sistemas expertos, dentro de cuyo ámbito SPAD puede ser considerado.

¹En particular, la encuesta nacional sobre «Condiciones de vida y aspiraciones de los ciudadanos franceses», realizada por el CREDOC (Centre de Recherche pour l'Etude et l'Observation des Conditions de Vie) de periodicidad semestral.

Los principios en los que se basa SPAD se pueden resumir en los siguientes puntos:

1. No tener en cuenta el modelo probabilístico subyacente de forma explícita.
2. Estar orientada al tratamiento de grandes tablas de datos.
3. Basado en la representación visual de la «información» contenida en los datos.
4. Búsqueda automática de la mejor caracterización posible entre todos los objetos participantes en el análisis (ejes factoriales, clases, variables, etc.).

Desde 1995 SPAD cuenta con una versión Windows, muy fácil de utilizar y que ha dejado obsoleto el antiguo lenguaje de comandos de las versiones DOS.

SPAD está estructurado en módulos, donde el módulo base es SPAD.N (Núcleo) y al cual nos referiremos en esta reseña. Otros módulos son: SPAD.D (Decisión) destinado a la estimación de modelos lineales generales, discriminación entre dos grupos, cálculo de la función de «score», etc; SPAD.S (Segmentación) que implementa los algoritmos de CART (Breiman et al. 1984) para la obtención de segmentaciones por árbol binario de decisión; SPAD.TM que implementa los métodos de análisis de tablas ternarias: Statis (Lavit, 1988) y AFM (Escofier, Pages 1990); SPAD.MC que implementa el Análisis Conjunto, especialmente indicado para aquellos problemas de diseño del «producto ideal», según las preferencias expresadas por los consumidores, y está en proceso el módulo SPAD.Local para la realización de análisis factoriales condicionales (sin tener que pasar por la estimación previa de ningún modelo) y clasificaciones con restricción de contigüidad.

En su versión Windows, SPAD.N comprende un editor para la captura de los datos y su diccionario², un sistema de menús para la elección de los análisis a ejecutar mediante una arquitectura de *ramas*³, un módulo gráfico para dibujar los gráficos factoriales y un editor de árboles jerárquicos.

El sistema está organizado de forma modular mediante *procedimientos*, cada uno definido por un ícono. Un procedimiento corresponde a un conjunto de operaciones estadísticas o de gestión pertinentes en una determinada fase del análisis. La secuenciación de íconos define una rama, la cual corresponde a una explotación concreta de una base de datos. Una ayuda en línea está siempre disponible para guiar al usuario en la elección de las opciones más adecuadas, y para poder cambiar los valores por defecto propuestos por el sistema.

²La captura se datos se realiza mediante una interficie del mismo estilo que la de EXCEL.

³Hemos traducido la palabra original *filière*, la cual da idea de secuencia que hay que ir resolviendo hasta llegar al análisis global de los datos, por la palabra más ecológica de rama, que también es una secuencia de nodos, los cuales, si la rama está bien definida, darán su fruto que son los resultados del análisis.

Los procedimientos pueden agruparse en:

Procedimientos de descripción estadística

- Caracterización de variables nominales.
- Caracterización de una partición.
- Caracterización de una variable continua.
- Caracterización de los ejes factoriales.
- Descripción sumaria de una tabla de datos.
- Tablas cruzadas.

Procedimientos factoriales

- Componentes Principales.
- Correspondencias Simples
- Correspondencias Múltiples
- Correspondencias Múltiples Condicionales
- Correspondencias Múltiples con elección de las modalidades.

Procedimientos de clasificación

- Clasificación jerárquica
- Clasificación mixta sobre una tabla de datos grande
- Partición del árbol jerárquico.

De comunicación

- Importación y exportación de ficheros ASCII.
- Importación de ficheros EXCEL, DBASE, etc.
- Exportación de resultados a EXCEL.
- Importación de ficheros SAS y de SPSS.

De gestión

- Creación de nuevas variables.
- Recodificación, variables cruzadas.
- Reponderación.
- Selección de muestras aleatorias.
- Archivo de coordenadas factoriales y de particiones.

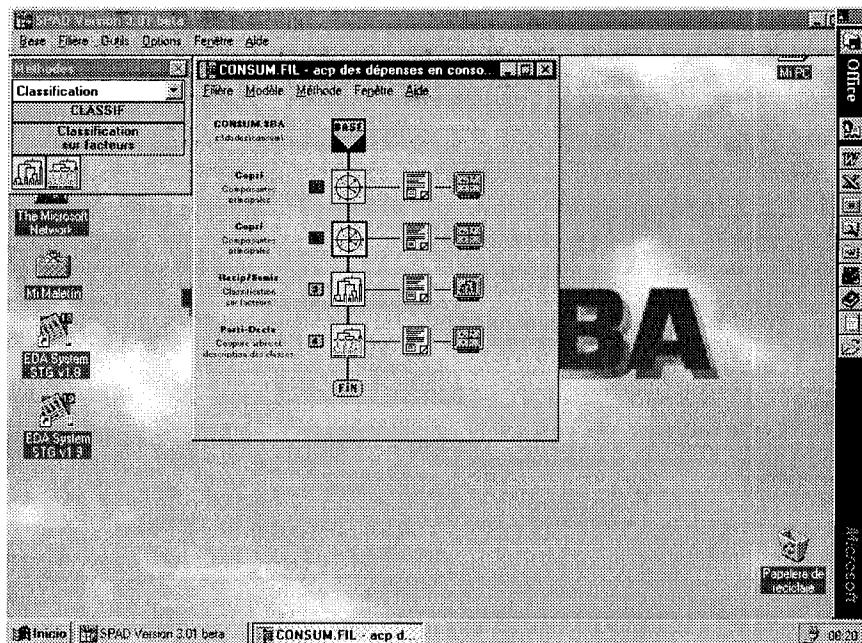


Figura 1. Rama típica de un análisis con SPAD.N

Como mero ejemplo de las salidas obtenidas por el procedimiento de Análisis de Componentes Principales, la Figura 2 presenta un ejemplo de representación simultánea de las direcciones de crecimiento de las variables (ejes originales del espacio de los individuos) junto con la proyección de los individuos sobre el primer plano factorial⁴.

En su última versión SPAD v3.2 incorpora algunas mejoras, entre las cuales el poder efectuar análisis directamente sobre tablas obtenidas por agregación según una cierta variable o variables categóricas (definidas según la conveniencia del usuario). Se tratará de un ACS si la tabla producida es de frecuencias o de un ACP si se trata de una tabla de medias. Se amplía la posibilidad de utilizar todas las facilidades gráficas provistas en los gráficos factoriales también para los diagramas bivariante de dos variables continuas. Poder efectuar gráficos de los residuos de una regresión múltiple. Gráficos en galería. Rotaciones 3D. Salida automática de los resultados tabulares en formato EXCEL. Conexión SPSS y SAS y concatenación o yuxtaposición de ficheros.

⁴Señalemos que esta representación conjunta es un caso particular de la representación denominada *biplot* (seguramente la más útil).

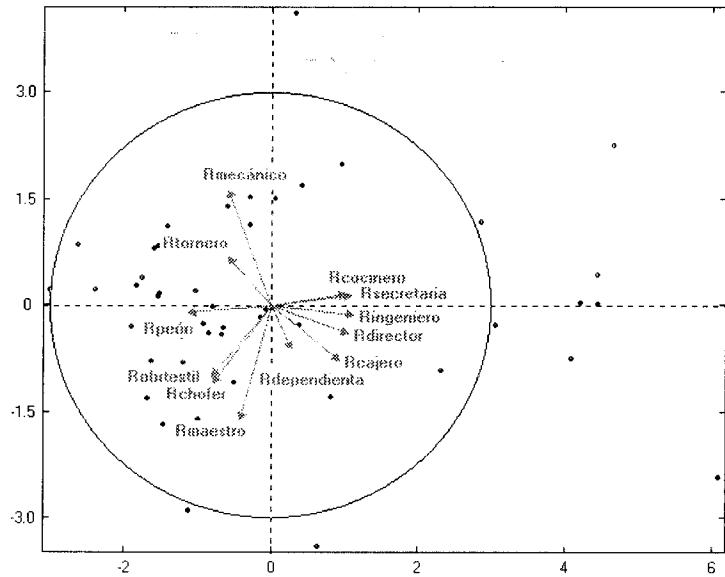


Figura 2. Representación simultánea de individuos y ejes originales

Para más información, dirigirse (en castellano mismo) a la siguiente dirección:

CISIA
 1 av. Herbillon
 94160 Saint Mandé (France)
 Tel. +33 1 43 74 20 20
 Fax +33 1 43 74 17 29
 E-mail: cisia@calva.net

REFERENCIAS

- [1] Breiman, L., Friedman, J.H., Olshen, R.A. and Stone, C.J. (1984). *Classification and Regression Trees*. The Wadsworth International Group, Belmont, California.
- [2] Escofier B., Pagès J. (1990). *Análisis Factoriales Simples y Múltiples*. Servicio Editorial Universidad del País Vasco. Bilbao.
- [3] Lavit Ch. (1988). *Analyse Conjointe de Tableaux Quantitatifs*. Masson, Paris.

- [4] **Lebart L., Morineau A., Tabard N.** (1977). *Téchniques de la Description Statistique*. Dunod, Paris.
- [5] **Lebart L., Morineau A., Fenelon J.P.** (1981). *Traitemet des Données Statistiques*. Dunod, Paris.
- [6] **Lebart L., Morineau A., Warwick K.** (1984). *Multivariate Descriptive Statistical Analysis*. John Wiley, New York.
- [7] **Lebart L., Morineau A., Fenelon J.P.** (1985). *Tratamiento Estadístico de Datos*. Marcombo, Barcelona.
- [8] **Lebart L., Morineau A., Piron M.** (1995). *Statistique Exploratoire Multidimensionnelle*. Dunod, Paris.

SUBScripcions a QÜESTIÓ

SUBSCRIPTIONS TO QÜESTIÓ

Butlleta de subscripció a la revista **Qüestió**

Nom i cognoms _____

Empresa/Institució _____

Adreça _____

Codi postal _____ Ciutat _____

Tel. _____ Fax _____ NIF _____

Data _____

Signatura

Desitjo subscriure'm a **Qüestió** per a l'any 1998.
El preu de la subscripció és de 3.000 PTA (IVA inclòs).

Forma de pagament

- Transferència al compte de la Caixa de Catalunya 2013-0100-53-0200698577
Comte d'Urgell 162, 08036 Barcelona
 - Domiciliació bancària al compte número

--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--
 - Taló nominatiu a l'Institut d'Estadística de Catalunya
 - Gir postal
 - En efectiu

Retornar aquesta butlleta (o una fotocòpia) a:

Qüestió:
Institut d'Estadística de Catalunya
Via Laietana, 58
08003 Barcelona

Exemplar per a l'entitat bancària

Autorització de domiciliació bancària per al pagament de les subscripcions anuals de la revista **Qüestió**

El sotasingnat _____
autoritza el Banc/Caixa _____
Adreça _____
Codi postal _____ Ciutat _____
a abonar les subscripcions a la revista Qüestió amb càrrec al seu compte número <input type="text"/>
Data _____
Signatura

Qüestió:

Institut d'Estadística de Catalunya

Via Laietana, 58
08003 Barcelona

NORMES PER A LA PRESENTACIÓ D'ARTICLES A QÜESTIIÓ

GUIDELINES FOR THE SUBMISSION OF ARTICLES FOR QÜESTIIÓ

GUIDELINES FOR THE SUBMISSION OF ARTICLES FOR QÜESTIÓ

The journal accepts for their publication original articles that are not being considered for publication in any other journal in the fields of Statistics, Operational Research, Official Statistics or Biometrics. Articles may be theoretical or applied, including teaching aspects and applications and will be accepted in English, French, Catalan or any of the official languages in Spain. For all deliveries, the journal will issue a receipt certificate corresponding to the presentation date of article, which will appear as date of «received» in its final publication.

On the other hand *Qüestió* invites all the sponsor entities, the collaborating institutions, the public and privat bodies and the entire scientific community related to statistics or operational research to the publication of institutional advertisements on courses, seminars, conventions and similar activities that will be held in our country. In any case the initiatives should always come from those entities interested in doing it. *Qüestió*'s aim is not that of doing a systematic search of events and, therefore, does not publish a comprehensive list of activities. Once its insertion is approved the advertisements will be published and re-printed if the originals are written in the same formal terms requested for the articles or be directly reproduced from the originals (without any editorial process from *Qüestió*).

The originals assigned to the thematic sections of *Qüestió* will be systematically reviewed by independent referees and members of the Editorial Board, whose result will be communicated to the main author of the article in order to correct, if necessary, any formal or content aspects. The «acceptance date» of the article, which will appear in its final publication, will be the date of sending the final version to the journal.

For the presentation of original articles, the author should send, to the Secretary of *Qüestió* (Institut d'Estadística de Catalunya), two nonreturnable copies of the paper typed on DIN-A4, one side of the paper only, double spaced and with wide margins. Each article should include a title, the name of the author or authors, their affiliation, full address and also an abstract of the paper (10-15 lines) at the beginning of the article and the translation of the title into English, followed by the main keywords (in the original language) and its assignation in the AMS classification as well. Bibliographical references should state the author's name followed by the year of publication in brackets [e.g.: Mahalanobis (1936), Rao (1928b)] and they should be listed at the end of the article in alphabetical order. Footnotes should be numbered in the article and appear at the foot of the corresponding page.

Once the evaluation has been passed, the author is required to provide the article on a diskette together with its printed version, processed by LATEX, preferably, or, failing that, Word Perfect (6.0A or earlier) or ASCII for text and tables. For graphics and figures, the appropriate formats of the editing programs PS, EPS, PCX o BMDP are strongly recommended. On the other hand, if the article is not written in English, the translation of its original title, abstract and keywords should be enclosed, as well as a full summary of the article in English (2-5 pages and with the same structure and titles that the original shows). The Secretary of *Qüestió* offers, to the authors who may request it, the precise rules of submission, the LATEX patterns for its edition and the appropriate AMS classification references.

QÜESTIÓ

Institut d'Estadística de Catalunya

Via Laietana, 58

08003 Barcelona

Phone: +34-934121536. Fax: +34-934123145